

# Mathematische Grundlagen der Quantenmechanik

Bernd Kuckert

21. September 2005

Dieses Skript ist auf der Grundlage der beiden Vorlesungen entstanden, die ich im Herbsttrimester 2001 in Amsterdam und im Wintersemester 2002/2003 in Hamburg gehalten habe. Das eine oder andere wurde korrigiert, ergänzt oder weggelassen.

Dieser Kurs ergänzt die einführenden Vorlesungen zur Quantenmechanik und das Studium der grundständigen Lehrbücher, wo erste Grundlagen, Rechen-techniken und Rechnungen erlernt werden. Das Motivieren von Rechnungen und das Auswerten von Rechenresultaten erfordert jedoch Vertrautheit mit dem allgemeinen mathematischen Rahmen und seinen Fallstricken, und die werden hier ergänzt.

Es wird hier im Gegensatz zu den Kursvorlesungen nicht historisch vorgegangen, sondern gleich mit dem mathematischen Formalismus begonnen.

## 1 Lineare Operatoren in Hilberträumen

**Definition 1.1** *Eine hermitesche Sesquilinearform auf einem  $\mathbb{C}$ -Vektorraum  $V$  beliebiger Dimension ist eine Abbildung  $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$  mit den Eigenschaften*

(i) *Die Abbildung  $y \mapsto \langle x, y \rangle$  ist linear für jedes  $x \in V$ .*

(ii)  *$\langle x, y \rangle = \overline{\langle y, x \rangle}$  für alle  $x, y \in V$ .<sup>1</sup>*

Die durch  $q(x) := \langle x, x \rangle$  definierte Abbildung  $q : V \rightarrow \mathbb{R}^{\geq 0}$  ist die **quadratische Form** von  $\langle \cdot, \cdot \rangle$ . Eine hermitesche Sesquilinearform und ihre quadratische Form heißen **positiv semidefinit** oder **nichtnegativ**, wenn  $q(x) \geq 0$  für alle  $x \in V$ . Sie heißen **positiv definit**, wenn  $q(x) > 0$  für alle  $x \neq 0$ .

Ein **inneres Produkt** ist eine positiv definite hermitesche Sesquilinearform, und ein **Prä-Hilbertraum** ist ein Vektorraum mit einem inneren Produkt.

<sup>1</sup>Anders formuliert: Eine Sesquilinearform ist eine Abbildung  $\langle \cdot, \cdot \rangle : V \times V \rightarrow \mathbb{C}$  mit Eigenschaft (i) und der Eigenschaft (i)', dass  $x \mapsto \langle x, y \rangle$  für jedes  $y$  antilinear ist. Eigenschaft (ii) macht die Sesquilinearform dann hermitesch, impliziert aber Eigenschaft (i)' schon zusammen mit Eigenschaft (i).

### Beispiel 1.2

Es sei  $\mathcal{D}_n := C_0^\infty(\mathbb{R}^n)$ ,  $n \in \mathbb{N}$ , der lineare Raum der unendlich oft differenzierbaren Funktionen von  $\mathbb{R}^n$  nach  $\mathbb{C}$  mit kompaktem Träger. Dann ist durch

$$\langle \psi, \phi \rangle_{\mathcal{D}} := \int_{\mathbb{R}^n} \overline{\psi(x)} \phi(x) dx$$

eine positiv definite Sesquilinearform definiert, für die sich auch die Aussagen der beiden nachfolgenden Lemmata leicht nachprüfen lassen.  $\square$

Im Folgenden sei  $(V, \langle \cdot, \cdot \rangle)$  ein Prä-Hilbertraum.

### Lemma 1.3 (Cauchy-Schwarz-Ungleichung)

$$|\langle x, y \rangle|^2 \leq q(x)q(y) \quad \text{für alle } x, y \in V.$$

*Beweis.* Für  $y = 0$  folgt die Ungleichung aus den Eigenschaften (i) und (ii) in Definition 1.1. Ist  $y \neq 0$ , so gilt für den Vektor  $e := y/\sqrt{q(y)}$ , dass  $q(e) = 1$ , und die Vektoren  $a := \langle e, x \rangle e$  und  $b := x - \langle e, x \rangle e$  sind zueinander orthogonal. Daraus folgt aber, dass  $q(a) + q(b) = q(a + b) = q(x)$ , also

$$q(x) \geq q(a) = |\langle e, x \rangle|^2 = \frac{|\langle y, x \rangle|^2}{q(y)}.$$

$\square$

### Lemma 1.4 Die Abbildung

$$V \ni x \mapsto \|x\| := \sqrt{q(x)}$$

ist eine Norm auf  $V$ .

*Beweis.* Die Abbildung ist positiv definit, d.h.  $\|x\| > 0$ , und sie ist homogen, d.h.  $\|\lambda x\| = |\lambda| \cdot \|x\|$ .

Die Dreiecksungleichung folgt aus der Cauchy-Schwarz-Ungleichung, denn

$$q(x + y) - q(x) - q(y) = \langle x, y \rangle + \langle y, x \rangle \leq 2|\langle x, y \rangle| \leq 2\|x\| \|y\|,$$

womit

$$\|x + y\|^2 \leq (\|x\| + \|y\|)^2,$$

und da die Wurzelfunktion monoton wachsend ist, folgt hieraus die Dreiecksungleichung.  $\square$

Ein Prä-Hilbertraum besitzt also mit dieser Norm eine natürliche Topologie.

**Definition 1.5** Ein vollständiger Prä-Hilbertraum wird **Hilbertraum** genannt. Zwei Hilberträume  $(\mathcal{H}_1, \langle \cdot, \cdot \rangle_1)$  und  $(\mathcal{H}_2, \langle \cdot, \cdot \rangle_2)$  werden **isomorph** genannt, wenn es eine lineare Bijektion  $U$  von  $\mathcal{H}_1$  auf  $\mathcal{H}_2$  gibt mit

$$\langle Ux, Uy \rangle_2 = \langle x, y \rangle_1 \quad \text{für alle } x, y \in \mathcal{H}_1.$$

Ein solcher Operator  $U$  wird dann ein **unitärer Operator** genannt.

### Beispiel 1.6

Aus einem linearen Raum  $V$  mit einer positiv semidefiniten hermiteschen Sesquilinearform  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  kann man in natürlicher Weise einen Hilbertraum konstruieren. Zunächst sei bemerkt, dass sich die Cauchy-Schwarz-Ungleichung (mit etwas mehr Aufwand) auch für positiv semidefinite hermitesche Sesquilinearformen beweisen lässt.<sup>2</sup> Die Abbildung  $x \mapsto \|x\| := \sqrt{q(x)}$  ist dann keine Norm, sondern lediglich eine **Halbnorm**, d.h.,  $\|x\| \geq 0$ , und es gelten Homogenität und Dreiecksungleichung. Eine Halbnorm definiert aber wie eine Norm einen Konvergenzbegriff und somit eine Topologie.

Ist nun  $\tilde{V}$  die Vervollständigung von  $V$  und  $\|\cdot\|_{\sim}$  die stetige Fortsetzung von  $\|\cdot\|$  auf  $\tilde{V}$ , so ist die Menge  $\mathcal{I} := \{\tilde{z} \in \tilde{V} : \|\tilde{z}\|_{\sim} = 0\}$  ein abgeschlossener linearer Unterraum von  $\tilde{V}$ . Der Quotientenraum  $\mathcal{H} := \tilde{V}/\mathcal{I}$  ist daher vollständig.

Alle Elemente von  $\mathcal{I}$  sind zu allen Elementen von  $\tilde{V}$  orthogonal. Daher gilt für  $\tilde{x}, \tilde{y} \in \tilde{V}$  und  $\tilde{z} \in \mathcal{I}$

$$\langle \tilde{x}, \tilde{y} \rangle_{\sim} = \langle \tilde{x}, \tilde{y} + \tilde{z} \rangle_{\sim} = \langle \tilde{x} + \tilde{z}, \tilde{y} \rangle_{\sim} = \langle \tilde{x} + \tilde{z}, \tilde{y} + \tilde{z} \rangle_{\sim}.$$

Ein inneres Produkt  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{H}}$  auf  $\mathcal{H}$  lässt sich daher definieren durch

$$\langle \tilde{x} + \mathcal{I}, \tilde{y} + \mathcal{I} \rangle_{\mathcal{H}} := \langle \tilde{x}, \tilde{y} \rangle_{\sim},$$

dieses verleiht dem vollständigen linearen Raum  $\mathcal{H}$  also die Struktur eines Hilbertraumes.  $\square$

### Beispiel 1.7 (Schrödingersche Wellenfunktionen)

Wendet man die Konstruktion des vorangehenden Beispiels an auf den Raum  $\mathcal{D}_n$  aus Beispiel 1.2, so erhält man den Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^n)$  der **Wellenfunktionen**, in dem sich die Schrödingersche Quantenmechanik abspielt.

Die Vervollständigung von  $\mathcal{D}_n$  ist der Raum  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$  aller **quadratintegrierbaren Funktionen** auf  $\mathbb{R}^n$ , d.h., aller Lebesgue-integrierbaren Funktionen  $\Psi : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  mit der Eigenschaft, dass auch die durch  $x \mapsto |\Psi(x)|^2$  integrierbar ist.

$\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$  ist aber kein Hilbertraum, da die stetige Fortsetzung von  $\langle \cdot, \cdot \rangle_{\mathcal{D}}$  auf  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$  positiv semidefinit, nicht aber positiv definit ist. Verschwindet nämlich eine von Null verschiedene Funktion  $f \in \mathcal{L}^2(\mathbb{R}^3)$  bis auf eine Lebesgue-Nullmenge überall ("fast überall"), so gilt  $\int |f(x)|^2 dx = 0$ . Die Funktionen mit dieser Eigenschaft bilden einen abgeschlossenen Unterraum  $\mathcal{I}$ , und  $L^2(\mathbb{R}^n) := \mathcal{D}_n/\mathcal{I}$  ist ein vollständiger linearer Raum. Ein inneres Produkt auf diesem Raum kann nun wie im vorangehenden Beispiel aus  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  konstruiert werden; es wird mit  $\langle \cdot, \cdot \rangle_2$  bezeichnet.

Statt  $L^2(\mathbb{R}^n)$  als Quotientenraum zu betrachten, kann es ebenso sinnvoll sein, ihn als Distributionenraum zu betrachten. Stimmen nämlich zwei Funktionen  $\Psi$  und  $\Phi$  aus  $\mathcal{L}^2(\mathbb{R}^n)$  fast überall miteinander überein, so induzieren sie eine und dieselbe Distribution, d.h.  $\int \Psi(x)\phi(x) dx = \int \Phi(x)\phi(x) dx$  für alle  $\phi \in \mathcal{D}_n$ . Das Arbeiten mit partiellen Differentialgleichungen kann dadurch sehr

<sup>2</sup>Siehe z. B. [17], Satz 1.4.

erleichtert werden. Allerdings sollte man nicht den Fehler machen, Differentialoperatoren im Hilbertraum allzu leichtfertig mit den Differentialoperatoren der Distributionentheorie gleichzusetzen; das kann, wie noch deutlich werden wird, zu Trugschlüssen führen.

Im Folgenden werden wir in diesem Sinne die Notation  $\langle \Psi, \varphi \rangle =: \Psi(\varphi)$  benutzen: das innere Produkt einer Wellenfunktion  $\Psi$  mit einer Testfunktion  $\varphi$  entspricht der Anwendung der Distribution  $\Psi$  auf die Testfunktion  $\varphi$ .  $\square$

**Beispiel 1.8 (Folgenraum  $\ell^2$ )**

Heisenberg hat die Quantenmechanik formuliert in einer Matrizenformulierung im Hilbertraum  $\ell^2$  aller quadratintegrierbaren Folgen in  $\mathbb{C}$ , d.h., in dem Raum aller Folgen  $(\xi_n)_n$  mit  $\|(\xi_n)_n\| := \sum_n |\xi_n|^2 < \infty$ .  $\square$

Im Folgenden wollen wir immer annehmen, dass  $\mathcal{H}$  ein Hilbertraum sei.

**Satz 1.9 (Projektionssatz)** *Ist  $M$  ein abgeschlossener Unterraum von  $\mathcal{H}$ , so gibt es zu jedem  $x \in \mathcal{H}$  genau ein  $y \in M$  und genau ein  $z \in M^\perp$  mit  $x = y + z$ .*

Beweis z. B. auf Seite 42 in [12].

Ein topologischer Raum wird bekanntlich *separabel* genannt wird, wenn er eine abzählbare dichte Teilmenge besitzt. Für einen Hilbertraum  $\mathcal{H}$  über  $\mathbb{C}$  genügt bereits weniger.

**Satz 1.10** *Ein Hilbertraum  $\mathcal{H}$  ist genau dann separabel, wenn er eine abzählbare Orthonormalbasis besitzt. Besitzt eine Orthonormalbasis von  $\mathcal{H}$  eine endliche Anzahl  $N$  von Elementen, dann ist  $\mathcal{H}$  isomorph zu  $\mathbb{C}^N$ . Besitzt eine abzählbare Orthonormalbasis von  $\mathcal{H}$  unendlich viele Elemente, so ist  $\mathcal{H}$  isomorph zu  $\ell^2$ .*

Beweis dieses Satzes z. B. in [12], Theorem II.7.

Ursprünglich war Schrödinger und Heisenberg diese Isomorphie nicht bekannt, weshalb sie ihre äußerlich so unterschiedlichen Zugänge zur Quantenmechanik zunächst als rivalisierend empfunden haben.

**Definition 1.11** *Ist  $D$  ein Unterraum von  $\mathcal{H}$  und  $A : D \rightarrow \mathcal{H}$  eine lineare Abbildung, so wird  $A$  ein **linearer Operator in  $\mathcal{H}$**  genannt. Der Raum  $D$  wird **Definitionsbereich von  $A$**  genannt und mit  $D(A)$  bezeichnet.*

**Beispiel 1.12**

Ist  $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  eine beliebige messbare Funktion, so ist auf dem Definitionsbereich

$$D_{\max}(V) := \{\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n) : V\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

ein linearer Operator  $M_V$  definiert durch  $M_V\Psi := V\Psi$ , der **Multiplikationsoperator mit der Funktion  $V$**  auf seinem maximalen Definitionsbereich.  $M_V$  wird auch kurz mit  $V$  bezeichnet. Multiplikationsoperatoren spielen sowohl in der mathematischen Analyse der linearen Operatoren in Hilberträumen im Allgemeinen als auch in der Quantenmechanik im Besonderen eine zentrale Rolle. In der Quantenmechanik treten sie insbesondere als Ortsoperator  $V(x) = x$  sowie als Potentialterme ( $V(x)$  ist dann die potentielle Energie eines Teilchens an der Stelle  $x$ ) auf.  $\square$

Der Definitionsbereich eines Operators  $A$  ist allerdings in der Regel nicht der Raum, auf dem eine Abbildungsvorschrift "irgendwie Sinn macht" (wie im vorangehenden Beispiel), sondern er ist Teil der Definition von  $A$ .

Schränkt man einen gegebenen Operator  $A$  auf einen Unterraum von  $D(A)$  ein, so erhält man einen anderen Operator, wie das bei Abbildungen halt so üblich ist, und es gibt viele Operatoren, die sich ohne Probleme zu Operatoren auf größeren Definitionsbereichen erweitern lassen.

Ein Operator ist also ein Paar  $(D, A)$  aus einem Definitionsbereich  $D$  und einer Abbildungsvorschrift  $A$ . In der Regel wird nur  $A$  erwähnt, und auch wir werden nicht jedesmal den Definitionsbereich erwähnen, wenn wir uns wiederholt auf einen Operator  $(D, A)$  beziehen.

Bis auf Weiteres gehen wir davon aus, dass  $(D(A), A) =: A$  einen linearen Operator in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$  bezeichnet. Wir erinnern daran, dass Stetigkeit von  $A$  bedeutet, dass für jede konvergente Folge  $(x_\nu)$  in  $D(A)$  mit  $\tilde{x} := \lim_{\nu \rightarrow \infty} x_\nu \in D(A)$  die Folge  $(Ax_\nu)$  gegen  $A\tilde{x}$  konvergiert.

**Definition 1.13**  *$A$  heißt beschränkt, wenn es ein  $K \geq 0$  gibt mit der Eigenschaft, dass*

$$\|Ax\| \leq K\|x\| \quad \text{für alle } x \in D(A).$$

Das Infimum  $\|A\|$  der Menge aller solchen  $K$  wird als die **Operatornorm** (oder einfach **Norm** von  $A$  bezeichnet.

Man prüft direkt nach, dass  $\|\cdot\|$  eine Norm ist.

**Beispiel 1.14**

Ist  $V : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{C}$  eine beschränkte messbare Funktion, so ist der maximale Definitionsbereich des zugehörigen Multiplikationsoperators  $M_V$  der gesamte Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^n)$ , und  $M_V$  ist beschränkt, da  $V\Psi$  integrierbar ist und da

$$\|M_V\Psi\|^2 = \int \overline{V(x)}\Psi(x) dx \leq \|V\|_\infty\|\Psi\|_2;$$

hier bezeichnet  $\|\cdot\|_\infty$ , wie üblich, die Supremumsnorm, d.h.

$$\|V\|_\infty := \inf\{K > 0 : |V(x)| \leq K \text{ für fast alle } x\}.$$

□

**Lemma 1.15** *Ein linearer Operator  $A$  ist genau dann stetig, wenn für jede Nullfolge  $(x_\nu)$  in  $D(A)$  auch  $(Ax_\nu)$  eine Nullfolge ist*

*Beweis.* Die Bedingung ist trivialerweise notwendig, da  $0 \in D(A)$ .

Es sei nun umgekehrt die Bedingung gegeben, und es sei  $(x_\nu)$  eine konvergente Folge mit Werten und Grenzwert  $\tilde{x}$  in  $D(A)$ . Dann ist  $(x_\nu - \tilde{x})$  eine Nullfolge mit Werten in  $D(A)$ , also ist nach der Bedingung auch  $(Ax_\nu - A\tilde{x})$  eine Nullfolge. Das beweist die Behauptung. □

**Lemma 1.16** *Ist  $A$  stetig und  $D(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$ , so gibt es einen eindeutig bestimmten stetigen Operator  $\bar{A}$  mit  $D(\bar{A}) = \mathcal{H}$  und  $\bar{A}x = Ax$  für alle  $x \in D(A)$ .*

*Beweis.*

- $D(A)$  ist n. V. dicht. Daher gibt es zu jedem  $x \in \mathcal{H}$  eine gegen  $x$  konvergente Folge  $(x_\nu)_n$  mit Werten in  $D(A)$ . Ist  $(x'_\nu)_\nu$  eine beliebige zweite gegen  $x$  konvergente Folge mit Werten in  $D(A)$ , so ist  $(x_\nu - x'_\nu)_\nu$  eine Nullfolge mit Werten in  $D(A)$ .
- $A$  ist n. V. stetig. Daher sind  $(Ax_\nu)_\nu, (Ax'_\nu)_\nu$  konvergente Folgen mit Werten in  $D(A)$  und Grenzwerten  $y$  bzw.  $z$ .
- Da  $(x_\nu - x'_\nu)_\nu$  eine Nullfolge ist, ist auch  $(A(x_\nu - x'_\nu))_\nu$  eine Nullfolge, also folgt  $y = z$ .
- Die durch  $x \mapsto y$  definierte Abbildung  $\bar{A} : \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}$  ist nach Konstruktion eine lineare und stetige Fortsetzung von  $A$ .  $\square$

In [12] auf Seite 10 findet sich ein interessanter Kommentar über die Rolle dieses Satzes bei der Definition des Riemann-Integrals.

**Satz 1.17**  *$A$  ist genau dann stetig, wenn  $A$  beschränkt ist.*

*Beweis.* Dass die Bedingung hinreichend ist, folgt direkt aus Lemma 1.15. Angenommen also,  $A$  sei nicht beschränkt.

- Dann gibt es eine beschränkte Folge  $(x_\nu)$  in  $D(A)$  mit der Eigenschaft, dass  $\|Ax_\nu\| \geq \nu\|x_\nu\|$  für alle  $\nu \in \mathbb{N}$ .
- Damit ist einerseits die Folge  $(y_\nu) := (x_\nu/\|Ax_\nu\|)$  eine Nullfolge,
- während gleichwohl  $\|Ay_\nu\| = 1$  für alle  $\nu \in \mathbb{N}$  nach Konstruktion gilt.
- Mit Lemma 1.15 folgt hieraus, dass  $A$  nicht stetig sein kann.  $\square$

Die auf ganz  $\mathcal{H}$  definierten beschränkten Operatoren bilden eine Banach-Algebra  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  (d.h. eine vollständige normierte Algebra).

Die der Quantenmechanik anzutreffenden Operatoren sind jedoch in der Regel nicht beschränkt. Die mathematische Beschreibung unbeschränkter Operatoren ist daher komplizierter und reichhaltiger sowohl an Begriffen als auch an Fallstricken.

**Definition 1.18**  *$A$  ist **dicht definiert**, wenn  $D(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$  liegt.*

*$A$  ist **hermitesch**, wenn für alle  $x, y \in D(A)$  gilt  $\langle x, Ay \rangle = \langle Ax, y \rangle$ .*

*$A$  ist **symmetrisch**, wenn  $A$  hermitesch und dicht definiert ist.*

**Lemma 1.19** *(i) Jeder Eigenwert eines hermiteschen Operators ist reell.*

*(ii) Ist  $A$  hermitesch und  $x \in D(A)$ , so ist  $\langle x, Ax \rangle \in \mathbb{R}$ .*

*Beweis.* (i) Angenommen,  $Ax = \lambda x$  für ein  $x \in D(A)$  mit  $\|x\| = 1$ . Dann gilt

$$\lambda = \lambda\|x\|^2 = \langle x, \lambda x \rangle = \langle x, Ax \rangle = \langle Ax, x \rangle = \langle \lambda x, x \rangle = \overline{\lambda}\|x\|^2 = \overline{\lambda}.$$

(ii)  $\langle x, Ax \rangle = \langle Ax, x \rangle = \overline{\langle x, Ax \rangle}$ . □

Die meisten Observablen in der Quantenmechanik, insbesondere aber Hamiltonoperatoren, werden durch Operatoren beschrieben, die nicht nur symmetrisch, sondern selbstadjungiert sind. Beispielsweise kann ein Operator, der nicht selbstadjungiert ist, keine Zeitentwicklung erzeugen, und Operatoren, die nicht selbstadjungiert sind, besitzen nicht die übliche Spektralzerlegung, durch die sie eine Interpretation als Observable erhalten (zumindest nicht in der üblichen Weise). Dies wird im nächsten Abschnitt näher ausgeführt; zunächst folgt nun die Definition und einige Beispiele.

**Definition 1.20** *Es sei  $D(A^*)$  der Raum aller Vektoren  $x \in \mathcal{H}$ , für die es je ein  $y_x \in \mathcal{H}$  gibt mit*

$$\langle x, Az \rangle = \langle y_x, z \rangle \quad \text{für alle } z \in D(A).$$

*Ist  $D(A)$  dicht in  $\mathcal{H}$ , so ist auf  $D(A^*)$  durch  $x \mapsto A^*x := y_x$  der **adjungierte Operator**  $A^*$  von  $A$  definiert.  $A$  heißt **selbstadjungiert**, wenn  $A = A^*$ .*

Ist  $A$  symmetrisch, so ist  $A^*$  eine Erweiterung von  $A$ , d.h.  $D(A) \subset D(A^*)$ , und  $A^*x = Ax$  für alle  $x \in D(A)$ .

Ist  $D(A)$  nicht dicht in  $\mathcal{H}$ , so kann es viele zu  $A$  adjungierte Operatoren geben. Ist  $B$  ein Operator mit  $\langle Bx, z \rangle = \langle x, Az \rangle$  für alle  $z \in D(A)$ , so ist für jeden Einheitsvektor  $u \in D(A)^\perp$  durch

$$B^u x := Bx + u\langle u, x \rangle$$

ein zweiter Operator gegeben, der zu  $A$  in dem genannten Sinne adjungiert (man sagt auch “formal adjungiert”) ist.

### Beispiel 1.21

Jeder auf seinem maximalen Definitionsbereich definierte Multiplikationsoperator ist offensichtlich selbstadjungiert. □

### Beispiel 1.22

Auf dem dichten Unterraum

$$D_{\underline{\Delta}} := \{\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}) : 0 \notin \text{supp}(\varphi)\}$$

von  $L^2(\mathbb{R})$  sei der Operator  $\underline{\Delta}$  erklärt durch  $\underline{\Delta}\varphi := \varphi''$ .

Eine Wellenfunktion  $\Psi$  ist genau dann in dem Definitionsbereich von  $\underline{\Delta}^*$  enthalten, wenn die zweite schwache Ableitung  $D^2\Psi$  eingeschränkt auf die Testfunktionen in  $D_{\underline{\Delta}}$  quadratintegrierbar ist. Ist nämlich Letzteres der Fall, so gibt es eine Funktion  $\Phi$  mit  $(D^2\Psi)|_{D_{\underline{\Delta}}}(\varphi) = \langle \Phi, \varphi \rangle$ , und

$$\langle \Psi, \underline{\Delta}\varphi \rangle_2 = \Psi(\varphi'') = (D^2\Psi)(\varphi) = (D^2\Psi)|_{D_{\underline{\Delta}}}(\varphi) = \langle \Phi, \varphi \rangle_2,$$

also gilt  $\underline{\Delta}^*\Psi = \Phi$ , und  $\Psi \in D(\underline{\Delta}^*)$ . Die Bedingung ist also hinreichend.

Ist umgekehrt  $\Psi \in D_{\underline{\Delta}}$  und ist  $\Phi (= \underline{\Delta}^*\Psi)$  eine Wellenfunktion mit  $\langle \Psi, \underline{\Delta}\varphi \rangle = \langle \Phi, \varphi \rangle$  für alle  $\varphi \in D_{\underline{\Delta}}$ , so folgt

$$\Phi(\varphi) = \Psi(\varphi'') = (D^2\Psi)(\varphi) = (D^2\Psi)|_{D_{\underline{\Delta}}}(\varphi)$$

für alle  $\varphi \in D_{\underline{\Delta}}$ , womit  $\Phi = (D^2\Psi)|_{D_{\underline{\Delta}}}$ . Somit lassen sich  $\Phi$  und  $\Psi$  in einer eindeutig bestimmten Weise zu quadratintegrierbaren Distributionen, auf ganz  $\mathcal{D}_n$ , mithin also zu Wellenfunktionen fortsetzen. Die Bedingung ist damit notwendig, womit  $D(\underline{\Delta}^*)$  aussieht wie behauptet.

$D^2\Psi$  kann am Nullpunkt eine Singularität in Form beispielsweise einer Deltafunktion besitzen. Der Grund hierfür ist, dass die Elemente von  $D_{\underline{\Delta}}$  diese “nicht wahrnehmen” und dass daher  $D^2\Psi$  auf  $D(\underline{\Delta})$  wie eine quadratintegrierbare Funktion  $\Phi$  wirkt, die man durch “Wegwerfen” der singulären Terme erhält.  $\underline{\Delta}^*$  ist allerdings nicht symmetrisch. Dann müsste nämlich  $D(\underline{\Delta}^*) \subset D(\underline{\Delta}^{**})$  gelten, und es wird nun gezeigt, dass dem nicht so ist. Es sei daher ad absurdum angenommen, dass  $\underline{\Delta}^*$  symmetrisch ist.

Es sind *alle* Testfunktionen in  $D(\underline{\Delta}^*)$  enthalten, und  $\underline{\Delta}^*\varphi = \varphi''$ . Ist  $\underline{\Delta}^*$ , wie unterstellt, symmetrisch, so muss auch  $D(\underline{\Delta}^{**})$  alle Testfunktionen enthalten. Da  $\underline{\Delta}^{**}$  eine Erweiterung von  $\underline{\Delta}^*$  ist, gilt  $\underline{\Delta}^{**}\varphi = \underline{\Delta}^*\varphi = \varphi''$ .

Die durch  $\Psi(x) := e^{-|x|}$  definierte Funktion liegt im Definitionsbereich von  $\underline{\Delta}^*$ , und  $\underline{\Delta}^*\Psi = \Psi$ . Ist nun  $\varphi$  eine Testfunktion mit  $\varphi(0) \neq 0$ , so folgt der Widerspruch

$$\langle \varphi, \Psi \rangle = \langle \varphi, \underline{\Delta}^*\Psi \rangle = \langle \underline{\Delta}^{**}\varphi, \Psi \rangle = \langle \varphi'', \Psi \rangle = D^2\Psi(\varphi) = \Psi(\varphi) + \varphi(0),$$

denn  $D^2\Psi = \Psi + \delta$ . □

### Beispiel 1.23

Auf dem Definitionsbereich

$$D_{\max}(\Delta) := \{\Psi \in L^2(\mathbb{R}) : D^2\Psi \in L^2(\mathbb{R}^n)\}$$

sei der **Laplace-Operator**  $\Delta$  definiert durch  $\Delta\Psi := D^2\Psi$ . Auch hier ist offensichtlich, dass  $\Delta$  selbstadjungiert ist.  $\Delta$  beschreibt die kinetische Energie eines freien Teilchens. □

Je nun, möchte man fragen, was soll das zweite dieser drei Beispiele? Immerhin können wir mit dem — selbstadjungierten — Laplace-Operator die kinetische Energie eines freien Teilchens beschreiben, und Potentialterme werden ebenfalls durch — selbstadjungierte — Multiplikationsoperatoren beschrieben. Für die Quantenmechanik auf der Linie, aber eben auch im  $\mathbb{R}^n$ , könnte man versucht sein zu denken, das reiche ja wohl aus, da man diese Operatoren ja nur noch addieren müsse.

So einfach ist es aber eben nicht. Es gibt wichtige Potentiale, die beispielsweise in einem Punkt singulär sind — beispielsweise das Coulomb-Potential. In einem singulären Punkt jedoch können sich sowohl der kinetische als auch

der Potentialterm kompliziert gebärden. Die Probleme beginnen schon beim Coulombpotential. Beim eindimensionalen Coulombpotential beispielsweise gilt weder  $D_{\max}(\Delta) \subset D_{\max}(V)$  noch  $D_{\max}(V) \subset D_{\max}(\Delta)$ , und auch der dreidimensionale Fall, der noch zu besprechen sein wird, ist in dieser Hinsicht delikat.

## 2 Selbstadjungierte Operatoren: Spektralsatz und Satz von Stone

Der Spektralsatz und der Satz von Stone illustrieren die Bedeutung, die selbstadjungierte Operatoren für die Quantenmechanik haben. Dies betrifft sowohl die Interpretation des mathematischen Rahmens als auch das Rechnen. Beide Sätze werden hier ohne Beweis angegeben.

Zunächst benötigen wir die Definition des Spektralmaßes. Eine detailliertere Darstellung der benötigten maßtheoretischen Konzepte und Sätze, die sehr schön an die quantenmechanische Begriffsbildung andockt, findet sich in [10].

**Definition 2.1** *Eine Abbildung  $E$ , die jeder Borelmenge  $I \subset \mathbb{R}$  eine orthogonale Projektion  $E(I)$  zuweist, wird **projektionswertiges Maß** genannt, wenn sie folgenden Bedingungen genügt:*

- (i)  $E(\emptyset) = 0$ , und  $E(\mathbb{R}) = 1$ .
- (ii) Ist  $(I_\nu)$  eine Folge paarweise disjunkter Borelmengen, so gilt

$$E\left(\bigcup_{\nu} I_{\nu}\right)x = \sum_{\nu} E(I_{\nu})x \quad \text{für alle } x \in \mathcal{H}.$$

Bedingung (ii), die der aus der abstrakten Maßtheorie bekannten Annahme der abzählbaren Additivität (auch  $\sigma$ -Additivität genannt) entspricht, ist ein erstes Beispiel für *starke Konvergenz* beschränkter Operatoren: Eine Folge  $(A_\nu)$  beschränkter Operatoren konvergiert stark gegen Null, wenn für jedes  $x \in \mathcal{H}$  die Folge  $(A_\nu x)$  in  $\mathcal{H}$  gegen Null konvergiert. Man schreibt Bedingung (ii) daher auch in der Form

$$E\left(\bigcup_{\nu} (I_{\nu})\right) = \underbrace{\text{s-lim}}_{n \rightarrow \infty} \sum_{\nu=1}^n E(I_{\nu}).$$

### Beispiel 2.2 (Bornsche Interpretation)

Das projektionswertige Maß  $E_{\text{Born}}$ , mit dem in der Quantenmechanik die Aufenthaltswahrscheinlichkeit eines Teilchens in einer räumlichen Dimension beschrieben wird, ordnet jeder Borelmenge  $I \subset \mathbb{R}$  den durch

$$E_{\text{Born}}(I)\psi(x) := \begin{cases} \psi(x) & \text{falls } x \in I; \\ 0 & \text{sonst} \end{cases}$$

definierten Projektionsoperator zu. Nach der Bornschen Wahrscheinlichkeitsinterpretation ist  $\langle \psi, E_{\text{Born}}(I)\psi \rangle_2$  die Wahrscheinlichkeit, das Teilchen in dem Gebiet  $I$  anzutreffen.

Mit dem Maß  $E_{\text{Born}}$  lässt sich auch illustrieren, dass nicht jede stark konvergente Folge von Operatoren in der Operatornorm konvergiert (während umgekehrt per definitionem jede normkonvergente Folge stark konvergiert). Ist nämlich  $(I_\nu)_\nu$  eine absteigende Folge von Borelmengen in  $\mathbb{R}$ , so haben alle Projektoren  $E_{\text{Born}}(I_\nu) - E_{\text{Born}}(I_{\nu+1})$  die Norm 1, sofern sie nicht identisch Null sind; somit konvergiert die Folge  $(E_{\text{Born}}(I_\nu))_\nu$  nicht in der Normtopologie, es sei denn, alle bis auf endlich viele ihrer Glieder stimmen miteinander überein. Für jede Wellenfunktion  $\psi$  konvergiert indes die Folge  $(E_{\text{Born}}(I_\nu)\psi)_\nu$  gegen Null, also konvergiert  $(E_{\text{Born}}(I_\nu))_\nu$  stark gegen Null.  $\square$

**Lemma 2.3** *Ist  $E$  ein projektionswertiges Maß, so gilt  $E(I \cap J) = E(I)E(J)$  für beliebige Borelmengen  $I, J \subset \mathbb{R}$ .*

*Beweis.* Ist  $I \cap J = \emptyset$ , so folgt aus der Additivität und der Idempotenz orthogonaler Projektionen

$$\begin{aligned} E(I) + E(J) &= E(I \cup J) = (E(I \cup J))^2 = (E(I) + E(J))^2 \\ &= E(I) + E(I)E(J) + E(J)E(I) + E(J), \end{aligned}$$

womit einerseits  $E(I)E(J) = -E(J)E(I)$ , während gleichzeitig

$$E(I)E(J) = E(I)^2E(J) = -E(I)E(J)E(I) = E(J)E(I)^2 = E(J)E(I),$$

d.h.  $E(I)E(J) = -E(J)E(I) = E(J)E(I) = 0$ .

Für beliebige Borelmengen  $I$  und  $J$  folgert man damit nun

$$\begin{aligned} E(I)E(J) &= (E(I \setminus J) + E(I \cap J))(E(J \setminus I) + E(I \cap J)) \\ &= \underbrace{E(I \setminus J)E(J \setminus I)}_{=0} + \underbrace{E(I \setminus J)E(I \cap J)}_{=0} + \underbrace{E(I \cap J)E(J \setminus I)}_{=0} + E(I \cap J), \end{aligned}$$

wie behauptet. Im letzten Schritt verschwinden die drei ersten Terme, da sie Produkte von Projektoren zu disjunkten Mengen sind.  $\square$

**Definition 2.4** *Ist  $E$  ein projektionswertiges Maß, und sind  $x, y \in \mathcal{H}$ , so wird durch*

$$\mu_{E,x,y}(I) := \langle x, E(I)y \rangle$$

*jeder Borelmenge  $I$  eine komplexe Maßzahl zugeordnet, und die Abbildung  $\mu_{E,x,y}$  ist ein komplexwertiges Maß, das **Spektralmaß**.*

**Theorem 2.5 (Spektralsatz)** *Zu jedem selbstadjungierten Operator  $A$  gibt es ein eindeutig bestimmtes projektionswertiges Maß  $E_A$  mit der Eigenschaft, dass*

$$D(A) = \{x \in \mathcal{H} : \int \lambda^2 d\mu_{E_A,x,x}(\lambda) < \infty\}$$

*und dass für alle  $x, y \in D(A)$  gilt*

$$\langle x, Ay \rangle = \int_{\mathbb{R}} \lambda d\mu_{E_A,x,y}(\lambda).$$

Umgekehrt definiert jedes projektionswertige Maß  $E$  einen selbstadjungierten Operator  $A_E$  durch  $E = E_{A_E}$ .

Den Beweis findet man in vielen Varianten in etlichen mathematischen Lehrbüchern über lineare Operatoren in Hilberträumen darunter [8, 10, 12].

### Beispiel 2.6 (Ortsoperator)

Das zu dem projektionswertige Maß  $E_{\text{Born}}$  aus Beispiel 2.2 gehörende Spektralmaß ist das Lebesgue-Maß; der zugehörige Operator  $\mathbf{Q}$  ist der **Ortsoperator**, d.h. der auf seinem maximalen Definitionsbereich definierte Multiplikationsoperator mit der Funktion  $x \mapsto x$ .  $\square$

### Beispiel 2.7 (Harmonischer Oszillator)

Auf dem Raum  $\mathcal{S}$  der **Schwartz-Funktionen**, d.h. dem Raum aller komplexwertigen  $C^\infty$ -Funktionen  $\varphi$  auf  $\mathbb{R}$  mit der Eigenschaft, dass  $\lim_{x \rightarrow \infty} x^n \varphi(x) = 0$  für alle  $n \in \mathbb{N}$  ist der Hamiltonoperator  $\underline{H}$  definiert durch

$$\underline{H}\Psi := [x \mapsto -\Psi'' + x^2\Psi(x)].$$

Aus den gängigen Lehrbüchern sind die Eigenwerte von  $\underline{H}$  als die Zahlen  $n + \frac{1}{2}$ ,  $n \in \mathbb{N}$ : die zugehörigen Eigenfunktionen  $\Psi_n$  sind definiert durch  $\Psi_n(x) := c_n e^{-x^2/2} H_n(x)$ , wobei  $c_n > 0$  eine Normierungskonstante und  $H_n$  das  $n$ . Hermite-Polynom ist. Diese Funktionen bilden eine Orthonormalbasis; die Projektionen auf die zugehörigen eindimensionalen Unterräume bilden ein projektionswertiges Maß. Dieses legt also eine selbstadjungierte Erweiterung  $H$  von  $\underline{H}$  fest.  $H$  ist der **Hamiltonoperator des linearen harmonischen Oszillators**.  $\square$

Ist nun  $A$  ein selbstadjungierter Operator und  $g$  eine beliebige komplexwertige Borel-messbare Funktion, so ist auf dem Definitionsbereich

$$D(g(A)) := \left\{ x \in \mathcal{H} : \int_{\mathbb{R}} |g(\lambda)|^2 d\mu_{E_A, x, x} < \infty \right\}$$

ein eindeutig bestimmter Operator  $g(A)$  definiert mit der Eigenschaft, dass

$$\langle x, g(A)y \rangle = \int_{\mathbb{R}} g(\lambda) d\mu_{E_A, x, y} \quad \text{für alle } x, y \in D(g(A)).$$

Alle Multiplikationsoperatoren (in der Ortsraumdarstellung) sind, sofern mit ihren maximalen Definitionsbereichen versehen, Funktionen des Ortsoperators.

Entsprechende Spektralsätze mit Integralen über  $\mathbb{C}$  lassen sich auch formulieren für jeden Operator  $A$ , der nicht notwendig selbstadjungiert, wohl aber *normal* ist, d.h.  $A^*A = AA^*$ . Wir werden das hier nicht weiter vertiefen und verweisen auf die Literatur (z. B. [8]).

Der Spektralsatz für selbstadjungierte Operatoren lässt sich auch noch in einer anderen Form angeben, die insbesondere in separablen Hilberträumen nützlich ist.

**Theorem 2.8** *Ist  $A$  ein selbstadjungierter Operator und ist  $\mathcal{H}$  separabel, so gibt es ein Borel-Maß  $\mu_A$  auf  $\mathbb{R}$ , einen unitären Operator  $U : \mathcal{H} \rightarrow L^2(\mathbb{R}, d\mu_A)$  und eine reellwertige Borel-messbare Funktion  $f_A$  mit der Eigenschaft, dass*

$$UAU^*[g] = [\lambda \mapsto \lambda f_A(\lambda)g(\lambda)].$$

Dass sich dieser Satz in der naheliegenden Weise benutzen lässt, um auch Funktionen selbstadjungierter Operatoren zu definieren, führen wir hier nicht weiter aus.

Insbesondere definiert der Spektralsatz zu jedem selbstadjungierten Operator  $A$  und jedes  $t \in \mathbb{R}$  den Operator  $e^{itA}$ , und die so definierten Operatoren besitzen die folgenden Eigenschaften:

**Satz 2.9** *Ist  $A$  selbstadjungiert, so gilt für die Operatoren  $U(t) := e^{itA}$ ,  $t \in \mathbb{R}$ :*

- (i) *Alle  $U(t)$  sind unitär.*
- (ii)  *$U(t)U(s) = U(t+s)$  und  $U(-t) = U(t)^{-1}$  für alle  $s, t \in \mathbb{R}$ , d.h.  $U$  ist Darstellung einer Gruppe.*
- (iii) *Für  $t \rightarrow t_0$  konvergiert  $U(t)x$  gegen  $U(t_0)x$  für jedes  $x$ , d. h.  $U$  ist stark stetig.*
- (iv)  *$x \in D(A)$  genau dann, wenn der Differenzenquotient  $(U(t)x - x)/t$  für  $t \rightarrow 0$  gegen  $iAx$  konvergiert, d.h.  $iA$  ist der **infinitesimale Erzeuger** von  $U$ .*

Für den Beweis verweisen wir auf die Literatur, siehe z. B. [12], Thm. VIII.7.

**Definition 2.10** *Eine operatorwertige Funktion  $U$  mit den Eigenschaften (i) und (ii) des vorangehenden Satzes wird eine **einparametrische unitäre Gruppe** genannt.*

**Satz 2.11 (Satz von Stone)** *Zu jeder stark stetigen einparametrischen Gruppe  $U$  in  $\mathcal{H}$  gibt es einen eindeutig bestimmten selbstadjungierten Operator  $A$  mit  $U(t) = e^{itA}$  für alle  $t \in \mathbb{R}$ .*

Auch für diesen Satz verweisen wir auf die Literatur, beispielsweise Thm. VIII.8. in [12].

### Beispiel 2.12 (Translationen und Impulsoperator)

$\mathcal{T}^n := (\mathbb{R}^n, +)$  ist eine additive Gruppe, die **Translationsgruppe**. Sie wirkt auf dem linearen Raum  $\mathbb{R}^n$  durch die **Translationen**  $T_a : \mathbb{R}^n \rightarrow \mathbb{R}^n$ ,  $a \in \mathbb{R}^n$ , die durch  $T_a x := x + a$  definiert sind. Eine unitäre Darstellung von  $\mathcal{T}^n$  in  $L^2(\mathbb{R}^n)$  ist definiert durch  $U(a)\Psi := [x \mapsto \Psi(x - a)]$ .

Die Translationen in einer gegebenen Richtung bilden stark stetige einparametrische Gruppen. Wir ermitteln die Wirkung des infinitesimalen Erzeugers dieser Gruppen nun für Testfunktionen. Da wir mit einer einparametrischen Gruppe arbeiten, genügt es, den Fall  $n = 1$  zu betrachten.

Ist also  $\varphi$  eine Testfunktion, so gilt

$$\lim_{a \rightarrow 0} \left[ x \mapsto \frac{\varphi(x - a) - \varphi(x)}{a} \right] = \phi' =: iP,$$

also wirkt der Erzeuger von  $\mathcal{T}^1$  auf  $\mathcal{D}_1$  vermöge  $\underline{P}\varphi := -i\varphi' = -i\partial_x$ . Der selbstadjungierte infinitesimale Erzeuger von  $T_x$  ist die  $x$ -Komponente  $P_x$  des Impulsoperators; dieser ist eine Erweiterung von  $\underline{P}$ .  $\square$

**Beispiel 2.13 (Drehungen und Drehimpulsoperator)**

Analog dem vorangehenden Beispiel erzeugt im  $\mathbb{R}^3$  die  $z$ -Komponente  $L_z$  des **Drehimpulsoperators**  $\mathbf{L}$  die Drehungen um die  $z$ -Achse. Bezeichnet — in lokalen Koordinaten —  $\alpha$  den Drehwinkel um die  $z$ -Achse, so ist  $L_z$  der auf seinem maximalen Definitionsbereich erklärte Differentialoperator  $-i\partial_z$ .

**Beispiel 2.14 (Dynamik und Hamiltonoperator)**

Es gibt Systeme, die keine Translationssymmetrie und somit keinen (bzw. keinen eindeutigen) selbstadjungierten Impulsoperator besitzen (beispielsweise ein Teilchen vor einer Wand), und es gibt Systeme, die keine Rotationssymmetrie aufweisen (dito) und die somit keinen (bzw. keinen eindeutigen) selbstadjungierten Drehimpulsoperator besitzen. Es kann Sinn machen, die Größen Impuls und Drehimpuls gleichwohl als Observable zu behandeln — was allerdings die Wahl von Randbedingungen oder eine flexiblere Interpretation als die mit Hilfe des Spektralsatzes erfordert. Eine reversible Zeitentwicklung, die für die Beschreibung endlich vieler beständiger Teilchen sowohl in der klassischen als auch in der Quantenmechanik charakteristisch ist, wird jedoch durch eine unitäre Dynamik beschrieben. Deren Erzeuger ist der Hamiltonoperator des Systems, und der muss *immer* selbstadjungiert sein.<sup>3</sup> es wird weiter unten noch deutlich werden, dass schon beim Keplerproblem die Forderung nach der Selbstadjungiertheit unerlässlich ist, wenn man nicht auf unphysikalischen Eigenfunktionen sitzen bleiben will. Beispiel 1.22 bietet einen Vorgeschmack der Gemengelage an, die sich typischerweise bei der Analyse singulärer Potentiale ergibt. Cave canem!  $\square$

Aussagen von dem Typ “Der Wert der Observablen  $A$  liegt in dem Intervall  $I$  und der Wert der Observablen  $B$  liegt in dem Intervall  $J$ ” lassen sich dann und nur dann machen, wenn  $A$  und  $B$  in dem folgenden Sinne gemeinsam messbar sind.

**Definition 2.15** *Zwei durch selbstadjungierte Operatoren  $A$  und  $B$  dargestellte quantenmechanische Observable heißen **kommensurabel** oder **gemeinsam messbar**, wenn für alle Borelmengen  $I, J \subset \mathbb{R}$  gilt*

$$E_A(I)E_B(J) = E_B(J)E_A(I) =: E_{A,B}(I \times J).$$

Das folgende einfache Lemma liefert eine gute Motivation für diese Definition.

---

<sup>3</sup>Dies betrifft den einfachsten, “zeitunabhängigen” Fall, in dem *ein* Hamiltonoperator eine einparametrische unitäre *Gruppe* erzeugt; im Falle sich ändernder äußerer Bedingungen (“zeitabhängiger Fall”) ist der Hamiltonoperator eine Funktion der Zeit, und die Dynamik ist ein zweiparametrischer *Kozykel* unitärer Propagatoren. Dies soll hier nicht weiter vertieft werden; eines bleibt aber festzuhalten: es geht in jedem Fall unitär zu, und quantenmechanische Hamiltonoperatoren sind selbstadjungiert.

**Lemma 2.16** Sind  $P$  und  $Q$  orthogonale Projektionen, so ist  $PQ$  genau dann auch eine orthogonale Projektion, wenn  $PQ = QP$ .

*Beweis.* Aus  $PQ = QP$  folgt  $PQPQ = P^2Q^2 = PQ$  und  $(PQ)^* = Q^*P^* = QP = PQ$ , also ist  $PQ$  eine orthogonale Projektion.

Ist  $PQ$  eine orthogonale Projektion, so gilt  $PQ = (PQ)^* = Q^*P^* = QP$ .  
□

**Beispiel 2.17**

Die Komponenten  $Q_1, \dots, Q_s$  des Ortsoperators sind gemeinsam messbar. In der üblichen Darstellung in  $L^2(\mathbb{R}^s)$  kann man das Produktmaß der zugehörigen Spektralmaße leicht angeben: Für jede Borelmenge  $K \subset \mathbb{R}^s$  gilt

$$E_{Q_1, \dots, Q_s}(K)\Psi(x) = E_Q(K)\Psi(x) = \begin{cases} \Psi(x) & \text{falls } x \in K; \\ 0 & \text{sonst.} \end{cases}$$

□

**Beispiel 2.18**

Nur durch eine Fouriertransformation unterscheidet sich von diesem Produktmaß das Maß, das zu den Komponenten des Impulsoperators gehört. □

Der nachfolgende Satz liefert ein hinreichendes und notwendiges Kriterium für Kommensurabilität:

**Theorem 2.19** Zwei selbstadjungierte Operatoren  $A$  und  $B$  in  $\mathcal{H}$  sind genau dann kommensurabel, wenn für alle  $s, t \in \mathbb{R}$  gilt  $e^{itA}e^{isB} = e^{isB}e^{itA}$ .

Für den Beweis verweisen wir wieder auf die Literatur, siehe z. B. [12], Thm. VIII.13.

**Beispiel 2.20 (Nelson)**

Aus diesem Satz folgt unmittelbar, dass die Bedingung  $AB = BA$  zwar immer notwendig, im allgemeinen aber nicht hinreichend ist für Kommensurabilität. Dies zeigt ein Gegenbeispiel von Nelson,<sup>4</sup> das wir hier kurz skizzieren.

Wir bezeichnen mit  $M$  die Riemannsche Fläche der Wurzelfunktion.<sup>5</sup> Auf  $M$  kann lokal das Lebesgue-Maß von  $\mathbb{R}^2$  vererbt werden; bezüglich dieses Maßes betrachten wir den Hilbertraum der quadratintegrierbaren Distributionen  $L^2(M)$ . Da alle separablen Hilberträume isomorph sind, impliziert jedes Gegenbeispiel in diesem Hilbertraum, dass es in jedem anderen Hilbertraum ein entsprechendes Gegenbeispiel geben muss.

<sup>4</sup>[12], S. 273.

<sup>5</sup>Also den Überlagerungsraum von  $\mathbb{C}$ , auf dem sich die Wurzelfunktion als analytische Funktion eindeutig definieren lässt. "Bastelanleitung": Man nehme zwei Kopien der komplexen Ebene, entferne die negativen reellen Achsen und klebe die beiden unteren Schnittkanten mit den oberen Schnittkanten der jeweils anderen Kopie zusammen.

Nun definieren aber die üblichen Impulsoperatoren  $-i\partial_x$  und  $-i\partial_y$  auf dem Definitionsbereich  $C_0^\infty(M)$  ebenso wie im  $\mathbb{R}^2$  (wesentlich) selbstadjungierte Operatoren (wir werden noch sehen, wie man das verifiziert), die miteinander (im  $AB = BA$ -Sinne) vertauschen, wo immer sie können. Andererseits erzeugen sie — wie im  $\mathbb{R}^2$  — die Translationen in  $x$ - bzw. in  $y$ -Richtung (wie sieht man das?). Die Translationen bilden in  $M$  aber keine abelsche Gruppe...

### 3 Das Kriterium für Selbstadjungiertheit

Im Folgenden ist wieder  $A$  ein linearer Operator mit Definitionsbereich  $D(A)$  in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ , soweit nichts Anderes bestimmt ist.

**Definition 3.1** Die **direkte Summe** zweier Hilberträume  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  mit inneren Produkten  $\langle \cdot, \cdot \rangle_1$  und  $\langle \cdot, \cdot \rangle_2$  ist die direkte Summe der Vektorräume  $\mathcal{H}_1$  und  $\mathcal{H}_2$  versehen mit dem inneren Produkt

$$\langle (x_1, x_2), (y_1, y_2) \rangle_{\mathcal{H}_1 \oplus \mathcal{H}_2} := \langle x_1, y_1 \rangle_1 + \langle x_2, y_2 \rangle_2.$$

Durch

$$\Gamma(A) := \{(x, Ax) : x \in D(A)\}$$

ist ein linearer Unterraum von  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  definiert, der als **Graph** von  $A$  bezeichnet wird. Der Graph von  $A$  erbt die natürliche Norm auf  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ :

$$\Gamma(A) \ni (x, Ax) \mapsto \|(x, Ax)\| := \sqrt{\|x\|^2 + \|Ax\|^2}.$$

$A$  heißt **abgeschlossen**, wenn  $\Gamma(A)$  abgeschlossen in  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  ist.

Ist auch  $B$  ein linearer Operator in  $\mathcal{H}$ , so wird  $B$  eine **Erweiterung** von  $A$  genannt, wenn  $\Gamma(A) \subset \Gamma(B)$ , man schreibt dann auch  $A \subset B$ .

$A$  ist **abschließbar**, wenn ein abgeschlossener Operator  $B$  in  $\mathcal{H}$  existiert mit  $A \subset B$ . Der (bzgl. der Ordnung  $\subset$ ) kleinste Operator  $B$  mit dieser Eigenschaft wird der **Abschluss**  $\bar{A}$  von  $A$  genannt.

**Lemma 3.2** Ist  $A$  beschränkt mit  $D(A) = \mathcal{H}$  (d.h.  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ ), so ist  $A$  abgeschlossen.

*Beweis.*

- Zu zeigen ist für gegebenes  $A \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$ , dass für jede Cauchyfolge  $(x_\nu, y_\nu) \in \Gamma(A)$  mit Grenzwert  $(x, y) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  auch  $(x, y) \in \Gamma(A)$  liegt.
- Aus  $(x_\nu, y_\nu) \rightarrow (x, y)$  folgt  $x_\nu \rightarrow x$ .
- Da  $A$  beschränkt ist, folgt daraus  $y_\nu = Ax_\nu \rightarrow Ax = y$ .
- Damit ist gezeigt, dass  $(x, y) = (x, Ax) \in \Gamma(A)$ . □

Ist der Kern  $\text{Ker}(A)$  von  $A$  trivial, dann besitzt  $A$  einen auf dem Bild  $\text{Ran}(A)$  definierten inversen Operator  $A^{-1}$ , der jedes  $y \in \text{Ran}(A)$  auf das eindeutig bestimmte  $x \in D(A)$  mit  $y = Ax$  abbildet. Es gilt dann

$$\Gamma(A^{-1}) = \{(x, y) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} : (y, x) =: U(x, y) \in \Gamma(A)\} = U(\Gamma(A)).$$

Hieraus folgt insbesondere, dass der inverse Operator eines abgeschlossenen Operators ebenfalls abgeschlossen ist.

Wenn  $A$  dicht definiert ist, gilt außerdem

$$\begin{aligned} \Gamma(A^*) &= \{(x, y) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} : \langle x, Az \rangle = \langle y, z \rangle \text{ für alle } z \in D(A)\} \\ &= \{(x, y) : \langle (x, y), (Az, -z) \rangle = 0 \text{ für alle } z \in D(A)\} \\ &=: (V(\Gamma(A)))^\perp, \end{aligned}$$

wobei  $V(x, y) := (y, -x)$ . Da orthogonale Komplemente in einem Hilbertraum immer abgeschlossene Räume sind, ist  $A^*$  folglich abgeschlossen.

**Satz 3.3** (i) *Ist  $A$  abgeschlossen und invertierbar, so ist auch  $A^{-1}$  abgeschlossen.*

(ii) *Ist  $D(A)$  dicht, so ist  $A^*$  abgeschlossen.*

(iii) *Ist  $D(A)$  dicht, so ist  $A$  genau dann abschließbar, wenn  $A^*$  dicht definiert ist. In diesem Falle gilt*

$$\overline{A} = (A^*)^* =: A^{**}.$$

(iv) *Ist  $D(A)$  dicht und  $A$  abschließbar, so gilt  $(\overline{A})^* = A^*$ .*

*Beweis.* (i) und (ii) wurden soeben gezeigt.

- Um (iii) zu zeigen, bemerken wir zunächst, dass  $V$  unitär ist und dass deshalb für jeden Unterraum  $\mathcal{K}$  von  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  gilt  $V(\mathcal{K}^\perp) = (V\mathcal{K})^\perp$ . Hieraus folgt

$$\Gamma(\overline{A}) = \overline{\Gamma(A)} = (\Gamma(A)^\perp)^\perp = (VV(\Gamma(A))^\perp)^\perp = (V(V\Gamma(A))^\perp)^\perp = (V\Gamma(A^*))^\perp.$$

- Ist nun  $A^*$  dicht definiert, dann gleicht dieser Ausdruck  $\Gamma(A^{**})$ .
- Ist  $A^*$  nicht dicht definiert, so folgt

$$(V\Gamma(A^*))^\perp \supset (V(D(A^*) \oplus \mathcal{H}))^\perp = (\mathcal{H} \oplus D(A^*))^\perp = \{0\} \oplus D(A^*) \neq \{0\} \oplus \{0\}.$$

- Diese Menge ist aber nicht der Graph einer (einwertigen) linearen Abbildung, daher ist  $\overline{\Gamma(A)}$  nicht der Graph eines linearen Operators,  $A$  also nicht abschließbar.
- (iv). Aus (ii) und (iii) folgt

$$A^* = \overline{A^*} = (A^*)^{**} = (A^{**})^* = (\overline{A})^*.$$

□

**Lemma 3.4** *Jeder symmetrische Operator ist abschließbar.*

*Beweis.* Da  $A$  symmetrisch ist, gilt  $A \subset A^*$ , und da  $A^*$  nach Satz 3.3 abgeschlossen ist, ist  $A$  abschließbar. □

**Definition 3.5** *Ist  $A$  symmetrisch, so heißt  $A$  wesentlich selbstadjungiert, wenn  $\bar{A}$  selbstadjungiert ist, d.h. wenn  $A^{**} = A^*$ .*

**Lemma 3.6** *Ist  $D(A)$  dicht, so ist*

$$\text{Ker}(A^*) = \text{Ran}(A)^\perp.$$

*Beweis.* Gegeben sei  $y \in \text{Ran}(A)$ ; dann gibt es per definitionem ein  $z \in D(A)$  mit  $y = Az$ .

- Ist  $x \in \text{Ker}(A^*)$ , so gilt

$$\langle x, y \rangle = \langle x, Az \rangle = \langle A^*x, z \rangle = 0,$$

also ist  $\text{Ker}(A^*) \subset \text{Ran}(A)^\perp$ .

- Ist  $x \in \text{Ran}(A)^\perp$ , so gilt

$$0 = \langle x, y \rangle = \langle x, Az \rangle = \langle 0, z \rangle,$$

also ist  $x \in \text{Ker}(A^*)$ , so dass  $\text{Ran}(A)^\perp \subset \text{Ker}(A^*)$  bewiesen ist.

□

**Satz 3.7 (vom abgeschlossenen Graphen)** *Ist  $A$  abgeschlossen und gilt  $D(A) = \mathcal{H}$ , so ist  $A$  beschränkt.*

*Beweis.*

- $\Gamma(A)$  ist ein Banachraum, da abgeschlossen.
- Von  $\Gamma(A)$  nach  $\mathcal{H}$  sind zwei stetige lineare Abbildungen  $\Pi_1$  und  $\Pi_2$  definiert durch

$$\Pi_1(x, Ax) := x, \quad \Pi_2(x, Ax) := Ax, \quad (x, Ax) \in \Gamma(A).$$

- $\Pi_1$  ist eine Bijektion, und nach dem Satz über inverse Abbildungen ([12], S. 83) besitzt jede stetige Bijektion zwischen zwei Banachräumen ein stetiges Inverses, also ist  $\Pi_1^{-1}$  stetig.
- Folglich ist  $A = \Pi_2 \circ \Pi_1^{-1}$  stetig und damit nach Satz 1.17 beschränkt.

□

Nun können wir auch zeigen, dass ein abgeschlossener Operator nicht notwendigerweise abgeschlossene Mengen auf abgeschlossene Mengen abbilden muss. Ein beschränkter Operator  $A$  kann nämlich einen unbeschränkten inversen Operator  $A^{-1}$  mit dichtem Definitionsbereich  $D(A^{-1})$  besitzen, und da  $D(A) = \mathcal{H}$  unter  $A$  auf  $D(A^{-1}) = \text{Ran}(A)$  abgebildet wird, ist  $A$  abgeschlossen, weil beschränkt, bildet aber trotzdem die abgeschlossene Menge  $\mathcal{H}$  auf  $D(A^{-1})$  ab. Da aber  $D(A^{-1})$  nach Voraussetzung dicht ist, kann wegen Satz 3.7  $D(A^{-1})$  nur dann abgeschlossen sein, wenn  $A^{-1}$  beschränkt ist.

**Satz 3.8 (Hellinger, Toeplitz)** *Ist  $A$  hermitesch und  $D(A) = \mathcal{H}$ , so ist  $A$  beschränkt.*

*Beweis.* Nach dem vorangehenden Satz genügt es zu zeigen, dass  $A$  abgeschlossen ist. Ist  $((x_\nu, Ax_\nu))$  eine Cauchyfolge in  $\Gamma(A)$  mit Grenzwert  $(x, y) \in \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ , so konvergieren erst recht die Folgen  $(x_\nu)$  und  $(Ax_\nu)$  in der Norm gegen  $x$  bzw.  $y$ , und es gilt für jedes  $z \in \mathcal{H} \equiv D(A)$

$$\langle z, y \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle z, Ax_n \rangle = \lim_{n \rightarrow \infty} \langle Az, x_n \rangle = \langle Az, x \rangle = \langle z, Ax \rangle,$$

also ist  $(x, y) = (x, Ax) \in \Gamma(A)$ . Damit ist  $A$  stetig und nach Satz 1.17 beschränkt.

□

Wenden wir uns nun der Frage zu, wann ein symmetrischer Operator  $A$  selbstadjungiert oder wesentlich selbstadjungiert ist. Hinreichend und notwendig für (wesentliche) Selbstadjungiertheit ist, dass  $A^*$  keine imaginären Eigenwerte besitzt. Das folgende Beispiel zeigt, dass dies sehr wohl möglich ist.

### Beispiel 3.9 (Teilchen im Kasten I)

*Energie.* In dem Hilbertraum  $L^2([-1, 1])$ , der ein Teilchen in einem Kasten mit harten Wänden beschreibt, ist auf dem dichten Definitionsbereich  $C_0^\infty((-1, 1))$  ein symmetrischer Operator  $\underline{\Delta}$  definiert durch  $\underline{\Delta}\varphi := -\varphi''$ .

Die Gleichungen  $-\Psi'' = \pm i\Psi$  besitzen die Lösungen  $\Psi_\pm^\pm(x) = \exp(\pm\sqrt{\pm i}x)$ . Diese Lösungen sind allesamt in  $L^2([-1, 1])$ , ja sogar in  $D(\underline{\Delta}^*)$  enthalten.  $\underline{\Delta}^*$  kann also nicht symmetrisch,  $\underline{\Delta}$  mithin nicht (wesentlich) selbstadjungiert sein.

$\underline{\Delta}$  kann jedoch zu einem selbstadjungierten Operator erweitert werden, indem man einen geeigneten größeren Definitionsbereich wählt. Wie der aussieht, wird weiter unten besprochen.

*Impuls.* Auf demselben Definitionsbereich ist ein symmetrischer Operator  $\underline{P}$  definiert durch  $\underline{P}\varphi := -i\varphi''$ . Der adjungierte Operator  $\underline{P}^*$  besitzt Eigenvektoren zu den Eigenwerten  $\pm i$ , nämlich  $\Psi(x) = e^{\pm ix}$ . Auch  $\underline{P}$  kann zu einem selbstadjungierten Operator erweitert werden. □

### Beispiel 3.10 (Teilchen vor einer Wand I)

*Energie.* In  $L^2(\mathbb{R}^{\geq 0})$  — dem Hilbertraum eines Teilchens vor einer harten Wand — ist auf dem dichten Definitionsbereich  $C_0^\infty(\mathbb{R}^> 0)$  ein symmetrischer Operator  $\underline{\Delta}$  definiert durch  $\underline{\Delta}\varphi := -\varphi''$ . Die Eigenwertgleichungen  $-\underline{\Delta}\Psi = \pm i$

besitzen die Lösungen  $\Psi(x) = \exp(\sqrt{\mp i}x)$ . Der Operator  $-\underline{\Delta}$  besitzt selbstadjungierte Erweiterungen.

*Impuls.* Auf demselben Definitionsbereich ist ein Operator  $\underline{P}$  definiert durch  $\underline{P}\varphi := -i\varphi''$ . Die Gleichungen  $-i\Psi' = \pm i\Psi$  besitzen die Lösungen  $\Psi(x) = e^{\mp x}$  von denen jedoch nur die erste quadratintegrierbar und im Definitionsbereich von  $\underline{P}$  liegt.  $\underline{P}$  besitzt also *keine* selbstadjungierte Erweiterung.  $\square$

**Theorem 3.11** *Ist  $A$  symmetrisch, so sind die folgenden Bedingungen äquivalent:*

- (i)  $A$  ist wesentlich selbstadjungiert.
- (ii)  $\text{Ker}(A^* - i) = \{0\} = \text{Ker}(A^* + i)$ .
- (iii)  $\overline{\text{Ran}(A + i)} = \mathcal{H} = \overline{\text{Ran}(A - i)}$ .
- (iv)  $\text{Ran}(A^{**} + i) = \mathcal{H} = \text{Ran}(A^{**} - i)$ .

*Beweis.*<sup>6</sup>

- (i)  $\Rightarrow$  (ii).
  - Da  $A$  wesentlich selbstadjungiert ist, gilt  $(A^*)^* = ((\overline{A})^*)^* = (A^{**}) = A^*$ , d. h.  $A^*$  ist selbstadjungiert.
  - Mit Lemma 1.19 folgt daraus

$$\{0\} = \text{Ker}((\overline{A})^* \pm i) = \text{Ker}(A^* \pm i),$$

wie behauptet.

- (ii)  $\Leftrightarrow$  (iii) folgt aus Lemma 3.6.
- (iii)  $\Rightarrow$  (iv). Gegeben sei  $y \in \mathcal{H}$ .
  - Da  $\text{Ran}(A^{**} + i) \supset \text{Ran}(A + i)$  dicht ist, gibt es eine Folge  $(x_\nu)$  von Punkten in  $D(A^{**})$  mit der Eigenschaft, dass  $(A^{**} + i)x_\nu$  gegen  $y$  konvergiert.
  - Da  $A^{**}$  symmetrisch ist, gilt

$$\|(A^{**} + i)z\|^2 = \|A^{**}z\|^2 + \|z\|^2 \quad \text{für alle } z \in D(A^{**}). \quad (1)$$

- Da die Folge  $((A^{**} + i)x_\nu)$  eine Cauchy-Folge in  $\text{Ran}(A^{**} + i)$  ist, folgt aus Gleichung 1, dass die Folge  $((x_\nu, A^{**}x_\nu))$  eine Cauchy-Folge in  $\Gamma(A^{**})$  ist.
- Da aber  $A^{**}$  abgeschlossen ist, folgt hieraus, dass  $(x_\nu, A^{**}x_\nu)$  einen Grenzwert  $(x, \eta) \in \Gamma(A^{**})$  besitzt.
- Nun konvergiert nach Voraussetzung  $(A^{**} + i)x_\nu$  gegen  $y$ , und wir haben gezeigt, dass  $x_\nu$  gegen ein  $x \in D(A^{**})$  und  $A^{**}x_\nu$  gegen ein  $\eta \in \text{Ran}(A^{**})$  konvergiert. Daraus folgert man nun aber sofort, dass  $y = \eta + ix \in \text{Ran}(A^{**} + i)$ , wie behauptet.

<sup>6</sup>vgl. [13], Thm. VIII.3 und Korollar.

- (iv)  $\Rightarrow$  (i). Da  $A$  symmetrisch ist, gilt  $A \subset A^*$ , also auch  $A^* \supset A^{**}$ . Um zu zeigen, dass  $A$  wesentlich selbstadjungiert ist, dass also  $A^* = A^{**}$ , genügt es zu zeigen, dass  $D(A^*) \subset D(A^{**})$ . Es sei also  $x \in D(A^*)$ .
  - Da  $\text{Ran}(A^{**} - i) = \mathcal{H}$ , gibt es ein  $z \in D(A^{**})$  mit  $(A^{**} - i)z = (A^* - i)x$ .
  - Da  $D(A^{**}) \subset D(A^*)$ , folgt  $(A^* - i)(x - z) = 0$ .
  - Da auch  $\text{Ran}(A^{**} + i) = \mathcal{H}$ , folgt aus Lemma 3.6, dass  $\text{Ker}(A^* - i) = \{0\}$ , also ist  $x = z \in D(A^{**})$ .

□

Man beachte, dass man in diesem Theorem die Zahl  $i$  durch eine beliebige komplexe Zahl aus  $\mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  ersetzen kann.

Aus dem vorangehenden Lemma ergibt sich nun sofort ein Korollar, das die entsprechenden Kriterien für Selbstadjungiertheit angibt.

**Theorem 3.12 (Thm. VII.2.8 in [18])** *Ist  $A$  symmetrisch, so sind die folgenden Bedingungen äquivalent:*

- (i)  $A$  ist selbstadjungiert.
- (ii)  $A$  ist abgeschlossen, und  $\text{Ker}(A^* - i) = \{0\} = \text{Ker}(A^* + i)$ .
- (iii)  $\text{Ran}(A + i) = \mathcal{H} = \text{Ran}(A - i)$ .

*Beweis.*

- (i)  $\Rightarrow$  (ii) ergibt sich aus dem vorangehenden Theorem.
- (ii)  $\Rightarrow$  (iii). Das vorangehende Theorem zeigt bereits, dass die Räume  $\text{Ran}(A \pm i)$  dicht in  $\mathcal{H}$  liegen. Es bleibt also zu zeigen, dass sie auch abgeschlossen sind. Es sei also  $y \in \mathcal{H}$  beliebig, und es sei  $x_n$  eine Folge in  $D(A)$  mit der Eigenschaft, dass  $(A + i)x_n$  gegen  $y$  konvergiert.
  - Da  $A$  symmetrisch ist, gilt  $\|(A + i)z\|^2 = \|Az\|^2 + \|z\|^2$ ; damit ist  $(A + i)$  also auf  $\text{Ran}(A + i)$  invertierbar, und das Inverse ist wegen  $\|(A + i)z\|^2 \geq \|z\|^2$  beschränkt und lässt sich eindeutig zu dem beschränkten Operator  $(A + i)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  fortsetzen.
  - Da die Folge  $((A + i)x_n)_n$  nach Voraussetzung konvergiert und da  $(A + i)^{-1}$  stetig ist, konvergiert auch die Folge  $(x_n)_n = ((A + i)^{-1}(A + i)x_n)_n$  gegen ein  $z \in \mathcal{H}$ , ist also insbesondere eine Cauchyfolge in  $D(A)$ .
  - Damit ist gezeigt, dass die Folge  $(x_n, (A + i)x_n)$  eine Cauchyfolge in  $\Gamma(A + i)$  ist, und da  $A$  abgeschlossen ist, liegt auch deren Grenzwert  $(z, y)$  in  $\Gamma(A + i)$ . Damit ist gezeigt, dass  $y \in \text{Ran}(A + i)$ .

- (iii)  $\Rightarrow$  (i). Angesichts des vorangehenden Lemmas bleibt zu zeigen, dass  $A$  abgeschlossen ist, wenn (iii) gilt. Da  $A$  symmetrisch ist, besitzt  $A + i$ , wie schon gezeigt, ein auf  $\text{Ran}(A)$  definiertes beschränktes Inverses. Da  $\text{Ran}(A) = \mathcal{H}$ , liegt dieses bereits in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ . Wegen Lemma 3.2 ist daher  $(A+i)^{-1}$  abgeschlossen, und mit Lemma 3.3 folgt, dass auch  $A+i$ , folglich also auch  $A$  abgeschlossen ist.

Die Beweise für  $A - i$  sind natürlich völlig analog.  $\square$

## 4 Stetigkeit und Wasserstoffatom

Alle physikalischen (reinen) Bindungs- und Streuzustände des Wasserstoffatoms können durch stetige Funktionen dargestellt werden. Dies wird bei der Bestimmung der isotropen Bindungs- und Streuzustände des Wasserstoffatoms als Ausschlusskriterium für mögliche unphysikalische Lösungen mit einer (die Quadratintegrierbarkeit *nicht* berührenden) Singularität 1. Ordnung am Nullpunkt gefordert. Die gängigen Lehrbücher begründen dies jedoch nicht weiter, oder sie geben gar ein falsches Argument.<sup>7</sup>

Mit Hilfe des D'Alembertschen Ansatzes lassen sich jedoch die fraglichen singulären Eigenfunktionen (nicht die verallgemeinerten Eigenfunktionen) direkt verwerfen. Hat man die radiale Gleichung für  $\ell = 0$  mit dem üblichen Ansatz  $u(r) := r\psi(r)$  auf die Form<sup>8</sup>  $-\frac{1}{2}u''(r) - \frac{1}{r}u(r) = Eu(r)$  gebracht, und ist  $u$  eine physikalische Lösung, so ist jede von  $u$  linear unabhängige zweite Lösung  $v$  von der Gestalt  $v = uw$ , wobei  $w$  eine beliebige glatte Funktion ist. Setzt man diesen Ansatz in die Schrödingergleichung ein und nutzt man aus, dass  $u$  die Schrödingergleichung löst, so erhält man  $w'u = -2u'w''$ . Da  $u$  und  $w$  linear unabhängig sind, ist  $w' \neq 0$ ; da  $u \neq 0$ , sind auch  $u'$  und  $w''$  nicht identisch Null. Es folgt

$$\frac{w'}{w''} = -2\frac{u'}{u},$$

<sup>7</sup>Dieses sieht wie folgt aus: Die Fundamentallösung der Poissongleichung, die Funktion  $x \mapsto \|x\|^{-1}$ , besitzt im Ursprung einen Pol 1. Ordnung. Daher müsse das Anwenden des Laplaceoperators auf jede andere Funktion mit einer Singularität 1. Ordnung einen Deltafunktionsterm enthalten. Da dieser aber nicht durch das Anwenden des Coulomb-Potentialterms kompensiert werden kann, könne es keine Eigenfunktion mit einer Singularität 1. Ordnung geben.

Hier wird übersehen, dass der Laplaceoperator, wenn er die Observable der kinetischen Energie darstellt, als Operator im Hilbertraum und eben *nicht* als schwache Ableitung im Distributionenraum fungiert. Ändert man eine Wellenfunktion in einer Nullmenge, so lässt das den zugehörigen Zustand unberührt. Wird also die Schrödingergleichung durch den Separationsansatz gelöst, so erhält man genau dann einen physikalischen Zustand, wenn nicht ein zwingendes Kriterium wie die Quadratintegrierbarkeit oder eben eine den Definitionsbereich charakterisierende Randbedingung verletzt ist.

Es wäre ja sonst auch nicht so recht klar, weshalb der Grundzustand  $\psi(x) = Ce^{-\|x\|}$ , der ja (wie auch die anderen  $s$ -Eigenfunktionen) nicht stetig differenzierbar ist, so offensichtlich eine Lösung sein soll; vgl. hierzu Beispiel 1.22.

<sup>8</sup>Wir wählen die Einheiten so, dass  $\hbar = m_e = e = 1$ . In diesen Einheiten hat der Bohrsche Radius  $0,529 \cdot 10^{-1}m$  den Wert 1.

also  $w' = u^{-2}$ . Da  $u$  im Unendlichen exponentiell abfällt, steigt  $v$  dort exponentiell an, ist also nicht quadratintegrierbar.

Ist allerdings  $u$  lediglich eine verallgemeinerte Eigenfunktion (ein verallgemeinerter Streuzustand also), so verfängt dieses Argument nicht, da  $u$  dann nur sehr allmählich abfällt. Noch wichtiger ist aber die *Definition* des Hamiltonoperators an sich. Denn nur abseits des Kraftzentrums ist diese offensichtlich, und dies reicht im allgemeinen nicht aus, um einen selbstadjungierten Operator festzulegen: Ist der Operator  $\underline{H}$  auf dem Definitionsbereich

$$D(\underline{H}) := \{\varphi \in C_0^\infty(\mathbb{R}^3) : 0 \notin \text{supp } \varphi\}$$

erklärt durch

$$\underline{H}\varphi := \left[ x \mapsto -\frac{1}{2}\Delta\varphi(x) - \frac{1}{\|x\|}\varphi(x) \right],$$

so ist damit nicht offensichtlich, ob  $\underline{H}$  wesentlich selbstadjungiert ist, d.h. ob  $\underline{H}^*$  selbstadjungiert ist (vgl. Beispiel 1.22).

Es lässt sich aber zeigen, dass

- alle Elemente von  $D_{\max}(\Delta)$  stetig sind und dass
- die Einschränkung  $H$  von  $\underline{H}^*$  auf diesen Bereich selbstadjungiert ist.

Die erste Behauptung folgt aus dem Sobolewschen Lemma.<sup>9</sup>

**Theorem 4.1 (Sobolewsches Lemma)** *Für jedes  $m \in \mathbb{N}$  wird der  $m$ -te Sobolewraum  $W_m(\mathbb{R}^s)$  definiert als der Raum aller temperierten Distributionen  $f$  mit regulärer Fouriertransformierter  $\hat{f}$  sowie der Eigenschaft, dass*

$$\|f\|_m^2 := \int (1 + \|\vec{k}\|^2)^m |\hat{f}(\vec{k})|^2 d^s \vec{k} < \infty.$$

Für jedes  $k < m - s/2$  gilt dann  $W_m \subset C^k(\mathbb{R}^n)$ .

Auf einen allgemeinen Beweis wird hier verzichtet. Mit Zusatzannahmen ergibt sich jedoch eine elementare Variante.

**Lemma 4.2** *Es sei  $\Psi$  eine quadratintegrierbare und bis auf den Nullpunkt überall glatte Funktion. Liegt  $\Psi$  im Definitionsbereich des Laplaceoperators, so ist  $\Psi$  stetig.*

*Beweis.*

- Es sei  $\phi$  eine Testfunktion mit  $\phi(\vec{x}) \equiv 1$  für alle  $\vec{x}$  mit  $\|\vec{x}\| < \varepsilon$ . Dann ist  $\Psi(1 - \phi)$  glatt und damit in  $D(\Delta)$ , also ist  $\Psi \in D(\Delta)$  genau dann, wenn auch  $\psi := \Psi\phi \in D(\Delta)$ . Wir nehmen an, das sei der Fall.
- Da der Träger von  $\psi$  nach Konstruktion kompakt ist, besitzt  $\psi$  eine glatte Fouriertransformierte  $\hat{\psi}$ .

<sup>9</sup>siehe z. B. [13], Thm. IX.24 oder ein fast beliebiges Buch über partielle Differentialgleichungen.

- Da wir annehmen, dass  $\psi \in D(\Delta)$ , gilt

$$\int |\hat{\psi}(\vec{k})| \|\vec{k}\|^2 d^3\vec{k} < \infty.$$

- Da  $\hat{\psi}$  andererseits glatt ist, folgt hieraus, dass  $\hat{\psi}$  beschränkt ist.
- Die Fouriertransformierte einer beschränkten Funktion ist stetig.  $\square$

Dies beweist die erste Behauptung. Die zweite Behauptung lässt sich damit begründen, dass  $V := -\frac{1}{x}$  eine infinitesimale Störung von  $T := -\frac{1}{2}\Delta$  ist. Wie das zu verstehen ist und warum hieraus die Selbstadjungiertheit von  $H$  folgt, wird durch das Theorem von Kato und Rellich spezifiziert, das im Folgenden bewiesen und angewandt wird.

Ist  $A$  ein abgeschlossener Operator, so ist per definitionem  $\Gamma(A)$  ein abgeschlossener Unterraum des Hilbertraumes  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  und damit selbst ein Hilbertraum. Ist nun  $B$  ein weiterer abgeschlossener linearer Operator in  $\mathcal{H}$  mit  $D(A) \subset D(B)$ , so ist durch  $(x, Ax) \mapsto (x, Bx)$  ein linearer Operator  $\iota(B) : \Gamma(A) \rightarrow \Gamma(B)$  definiert. Ist  $\iota(B)$  beschränkt, so gibt es per definitionem ein  $c \geq 0$  mit

$$\|x\|^2 + \|Bx\|^2 \leq c^2(\|x\|^2 + \|Ax\|^2) \quad \text{für alle } x \in D(A),$$

woraus insbesondere folgt, dass

$$\|Bx\| \leq c(\|x\| + \|Ax\|) \quad \text{für alle } x \in D(A).$$

**Definition 4.3** *Ein linearer Operator  $B$  in  $\mathcal{H}$  mit  $D(A) \subset D(B)$  heißt **A-beschränkt**, wenn es ein  $c \in \mathbb{R}^{\geq 0}$  gibt mit*

$$\|Bx\| \leq c(\|Ax\| + \|x\|) \quad \text{für alle } x \in D(A).$$

Das Infimum aller  $a \geq 0$ , zu denen es ein  $b < \infty$  gibt mit

$$\|Bx\| \leq a\|Ax\| + b\|x\| \quad \text{für alle } x \in D(A),$$

wird als die **A-Schranke von  $B$**  bezeichnet. Wenn diese Schranke Null ist, dann wird  $B$  eine **infinitesimale Störung von  $A$**  genannt, und man schreibt  $B \ll A$ .

Ist  $a = 0$  eine mögliche Wahl, so ist  $B$  natürlich ein beschränkter Operator.

**Theorem 4.4 (Kato, Rellich)** *Ist  $A$  selbstadjungiert und  $B$  ein  $A$ -beschränkter symmetrischer Operator mit  $A$ -Schranke  $< 1$ , so ist der auf  $D(A)$  definierte Operator  $A + B$  selbstadjungiert.*

Der Satz von Kato und Rellich garantiert, dass zumindest in dem darin beschriebenen Sinne Schrödingeroperatoren und die damit verbundenen Dynamiken stabil sind gegenüber “infinitesimalen” Störungen.

Für seinen Beweis wird etwas elementare Spektraltheorie benötigt. Wie oben sei  $A$  wieder ein linearer Operator in  $\mathcal{H}$ .

**Definition 4.5** *A heißt invertierbar in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , wenn es ein  $A^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$  gibt mit  $A^{-1}Ax = x$  für alle  $x \in D(A)$  und mit  $AA^{-1}x = x$  für alle  $x \in \text{Ran}(A)$ .*

**Beispiel 4.6**

Es sei  $\gamma$  die normierte Gaußsche Glockenkurve. Der auf ganz  $\mathcal{H}$  definierte beschränkte Operator  $M_\gamma$  der Gaußschen Glockenfunktion ist *nicht* invertierbar in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , der auf seinem maximalen Definitionsbereich definierte unbeschränkte Operator  $M_{[x \rightarrow \gamma(x)^{-1}]}$  ist invertierbar in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ .

Ist  $A$  invertierbar in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , so ist  $A^{-1}$  genau dann eindeutig bestimmt, wenn  $\text{Ran}(A)$  dicht ist.

**Lemma 4.7** *Jeder in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  invertierbare Operator ist abgeschlossen.*

*Beweis.* Ist  $A$  ein in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  invertierbarer Operator, so ist  $A^{-1}$  beschränkt, wegen Lemma 3.2 also auch abgeschlossen. Definiert man, wie schon oben, den Operator  $U : \mathcal{H} \oplus \mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$  durch  $U(x, y) := (y, x)$  auf  $D(U) = \mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ , so gilt

$$\Gamma(A) \subset U\Gamma(A^{-1}).$$

Da jedoch  $\Gamma(A^{-1})$  abgeschlossen ist und da  $U$  in beiden Richtungen stetig (also ein Homöomorphismus) ist, ist  $\Gamma(A) = U(\Gamma(A^{-1}))$  abgeschlossen.  $\square$

**Definition 4.8** *Die Resolventenmenge  $\rho(A)$  von  $A$  ist die Menge aller  $\lambda \in \mathbb{C}$  mit der Eigenschaft, dass  $A - \lambda$  in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  invertierbar ist. Die Funktion*

$$\rho(A) \ni \lambda \mapsto R_A(\lambda) := (A - \lambda)^{-1} \in \mathcal{B}(\mathcal{H})$$

*wird die Resolvente von  $A$  genannt. Das Spektrum  $\sigma(A)$  von  $A$  ist definiert durch  $\sigma(A) := \mathbb{C} \setminus \rho(A)$ .*

Ist  $A$  nicht abgeschlossen, so folgt aus Lemma 4.7 sofort, dass  $\rho(A) = \emptyset$ . In den uns interessierenden Fällen wird  $A$  immer symmetrisch, insbesondere also abschließbar sein. Wir werden im Folgenden daher immer stillschweigend annehmen, dass  $A$  abgeschlossen ist.

**Satz 4.9**  *$\rho(A)$  ist eine offene Menge, und  $R_A$  ist eine analytische Funktion, d.h. für jedes  $\lambda \in \rho(A)$  gibt es ein  $\varepsilon > 0$  und eine Folge  $(B_\nu)$  in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  mit der Eigenschaft, dass für jedes  $\mu \in \mathbb{B}_\varepsilon(\lambda)$  gilt*

$$R_A(\mu) = \sum_{\nu \in \mathbb{N}} B_\nu (\mu - \lambda)^\nu;$$

*die Reihe konvergiert hierbei in der Operatornorm auf  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ .*

*Beweis.*

- Mit  $\lambda \in \rho(A)$  und  $\mu \in \mathbb{B}_{\|(A-\lambda)^{-1}\|^{-1}}(\lambda)$  gilt für jedes  $x \in D(A)$

$$(A - \mu)x = (1 - (A - \lambda)^{-1}(\mu - \lambda))(A - \lambda)x =: (1 - B)(A - \lambda)x,$$

also ist  $A - \mu$  das Produkt des in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  invertierbaren Operators  $A - \lambda$  und des beschränkten Operators  $(1 - B)$ .

- Aus  $\mu \in \mathbb{B}_{\|(A-\lambda)^{-1}\|^{-1}}(\lambda)$  folgt nun  $|\mu - \lambda| < \|(A - \lambda)^{-1}\|^{-1}$ , womit  $\|B\| = \|(A - \lambda)^{-1}(\mu - \lambda)\| < 1$ , also liefert die Neumannsche Reihe

$$(1 - B)^{-1} = \sum_{\nu} B^{\nu}$$

im Sinne der Normkonvergenz in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , denn

$$\left\| \sum_{\nu} B^{\nu} \right\| \leq \sum_{\nu} \|B\|^{\nu} = \frac{\|B\|}{1 - \|B\|}$$

(geometrische Reihe) ist wegen  $\|B\| < 1$  endlich.<sup>10</sup> Dies beweist, dass  $A - \mu$  für jedes  $\mu \in \mathbb{B}_{\|(A-\lambda)^{-1}\|^{-1}}(\lambda)$  invertierbar in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  ist und dass folglich  $\rho(A)$  offen ist.  $\square$

Der vorangehende Satz zeigt gleichzeitig, dass  $\sigma(A)$  eine abgeschlossene Teilmenge von  $\mathbb{C}$  ist.

Über das Spektrum selbstadjungierter Operatoren können wir nun zeigen, dass es eine Teilmenge der reellen Achse sein muss. Wir gehen dabei in mehreren Schritten vor.

**Lemma 4.10** *Ist  $A$  symmetrisch, so ist  $A - \lambda$  für jedes  $\lambda \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  eine injektive Abbildung von  $D(A)$  auf  $\text{Ran}(A - \lambda)$ . Auf  $D((A - \lambda)^{-1}) = \text{Ran}(A - \lambda)$  ist daher  $(A - \lambda)^{-1}$  definiert durch  $\Gamma((A - \lambda)^{-1}) = U(\Gamma(A - \lambda))$ .  $(A - \lambda)^{-1}$  ist beschränkt, und*

$$\|(A - \lambda)^{-1}\| \leq |\text{Im}(\lambda)|^{-1}.$$

Man beachte, dass  $\text{Ran}(A - \lambda)$  im Allgemeinen *nicht* dicht ist, vgl. nochmals Theorem 3.11.

*Beweis.*

- Mit  $\rho := \text{Re}(\lambda)$  und  $\mu := \text{Im}(\lambda)$  gilt für jedes  $x \in D(A)$

$$\begin{aligned} \|(A - \lambda)x\|^2 &= \langle (A - \rho - i\mu)x, (A - \rho - i\mu)x \rangle \\ &= \langle (A - \rho)x, (A - \rho)x \rangle + \langle \mu x, \mu x \rangle \\ &\quad + i\mu(\langle x, (A - \rho)x \rangle - \langle (A - \rho)x, x \rangle). \end{aligned}$$

<sup>10</sup>Dass die Neumannsche Reihe das Inverse von  $1 - B$  liefert, folgt aus

$$(1 - B) \sum_{\nu} B^{\nu} = \sum_{\nu} (B^{\nu} - B^{\nu+1}) = 1;$$

beachte hierbei, dass die letzte Gleichheit die absolute Konvergenz der Neumannschen Reihe ausnutzt. Dies beweist, dass  $R_A$  in  $\mathbb{B}_{\|(A-\lambda)^{-1}\|^{-1}}(\lambda)$  analytisch ist, und da  $\lambda \in \rho(A)$  beliebig ist, ist  $R_A$  analytisch in ganz  $\rho(A)$ .

- Da  $A$  und damit auch  $A - \rho$  symmetrisch ist, heben sich die Terme in der letzten Klammer weg, so dass

$$\|(A - \lambda)x\|^2 \geq \mu^2 \|x\|^2.$$

- Für jedes  $y = (A - \lambda)x \in \text{Ran}(A - \lambda)$  gilt also

$$\|(A - \lambda)^{-1}y\| = \|x\| \leq |\mu|^{-1} \|y\|,$$

damit ist  $(A - \lambda)^{-1}$  beschränkt, und  $\|(A - \lambda)^{-1}\| \leq |\mu|^{-1}$ .

□

**Satz 4.11**  $A$  ist genau dann selbstadjungiert, wenn  $\sigma(A) \subset \mathbb{R}$ .

*Beweis.* Ist  $A$  selbstadjungiert und ist  $\zeta \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$ , so folgt aus Theorem 3.12 und seinem Beweis, dass  $\text{Ran}(A + \zeta) = \mathcal{H}$ . Da nach Lemma 4.10 aber der auf  $\text{Ran}(A + \zeta)$  erklärte Operator  $(A + \zeta)^{-1}$  beschränkt ist, ist  $A + \zeta$  invertierbar in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$ , so dass  $\zeta \in \rho(A)$ . Die Bedingung ist also notwendig. Dass sie auch hinreichend ist, folgt ebenfalls aus Theorem 3.12.

□

*Beweis von Theorem 4.4.* Aus den Voraussetzungen folgt unmittelbar, dass der auf  $D(A)$  erklärte Operator  $A + B$  symmetrisch ist. Wegen Theorem 3.11 genügt es daher zu zeigen, dass es ein  $\varepsilon > 0$  gibt mit der Eigenschaft, dass  $\text{Ran}(A + B \pm i\varepsilon) = \mathcal{H}$ . Wir zeigen dies für den Operator  $A + B + i\varepsilon$ ; der andere Fall ist analog.

- Da  $A$  nach Voraussetzung selbstadjungiert ist, gilt wegen Korollar 3.12 bereits  $\text{Ran}(A + i\varepsilon) = \mathcal{H}$ .
- Aus demselben Korollar folgt, dass  $D(A + i\varepsilon)^{-1} = \mathcal{H}$ , und da andererseits

$$\text{Ran}((A + i\varepsilon)^{-1}) = D(A + i\varepsilon) = D(A) \subset D(B),$$

ist die folgende Zerlegung von  $A + B + i\varepsilon$  sinnvoll:

$$\begin{aligned} (A + B + i\varepsilon)x &= (1 + \underbrace{B(A + i\varepsilon)^{-1}}_{=: C_\varepsilon})(A + i\varepsilon)x \\ &=: (1 + C_\varepsilon)(A + i\varepsilon)x \end{aligned}$$

für alle  $x \in D(A) = D(A + B)$  und für alle  $\varepsilon > 0$ .

- Da  $(A + i\varepsilon)$  bereits ein Inverses in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  besitzt, bleibt zu zeigen, dass auch  $1 + C_\varepsilon$  ein Inverses in  $\mathcal{B}(\mathcal{H})$  besitzt, denn dann ist der beschränkte Operator  $(A + i\varepsilon)^{-1}(1 + C_\varepsilon)^{-1}$  invers zu  $A + B + i\varepsilon$ .
- Hierfür wiederum ist hinreichend, dass  $C_\varepsilon$  beschränkt ist mit  $\|C_\varepsilon\| < 1$ , denn dann liefert die Neumann-Reihe den gesuchten zu  $1 + C_\varepsilon$  inversen beschränkten Operator. Dies lässt sich folgendermaßen zeigen:

– Da  $B$  nach Voraussetzung  $A$ -beschränkt ist, gibt es  $a, b \geq 0$  mit

$$\|C_\varepsilon x\| = \|B(A + i\varepsilon)^{-1}x\| \leq a \underbrace{\|A(A + i\varepsilon)^{-1}x\|}_{=:T_1} + b \underbrace{\|(A + i\varepsilon)^{-1}x\|}_{=:T_2}. \quad (2)$$

– Da  $A$  nach Voraussetzung selbstadjungiert ist, folgt aus Theorem 3.11, dass  $\text{Ran}(A + i\varepsilon) = \mathcal{H}$ , also ist  $z := (A + i\varepsilon)^{-1}x$  ein Element von  $D(A)$ .

– Da  $A$  insbesondere symmetrisch ist, gilt

$$\|(A + i\varepsilon)z\|^2 = \|Az\|^2 + \varepsilon^2\|z\|^2,$$

– womit

$$\begin{aligned} T_1^2 &= \|A(A + i\varepsilon)^{-1}x\|^2 = \|Az\|^2 \\ &= \underbrace{\|(A + i\varepsilon)z\|^2}_{=x} - \varepsilon^2\|z\|^2 \leq \|x\|^2, \end{aligned}$$

also  $T_1 \leq \|x\|$ .

– Wegen Lemma 4.10 gilt andererseits  $\|(A + i\varepsilon)^{-1}\| \leq \varepsilon^{-1}$  für jedes  $\varepsilon > 0$ , woraus sofort  $T_2 \leq \varepsilon^{-1}\|x\|$  folgt.

– Einsetzen in Ungleichung (2) ergibt nun  $\|C_\varepsilon x\| \leq (a + b\varepsilon^{-1})\|x\|$ .

– Da die  $A$ -Schranke von  $B$  kleiner als 1 ist, kann  $a < 1$  ohne Beschränkung der Allgemeinheit angenommen werden. In diesem Fall folgt aber für alle  $\varepsilon > b/(1 - a)$ , dass  $\|C_\varepsilon\| < 1$ .

□

Mit Hilfe dieses Satzes kann jetzt gezeigt werden, dass der oben definierte Operator  $H$  selbstadjungiert ist, damit eine Zeitentwicklung erzeugt und deshalb als Hamiltonoperator des Wasserstoffatoms zu betrachten ist. Hierzu sei  $T = -\frac{1}{2}\Delta$  auf dem maximalen Definitionsbereich von  $\Delta$  definiert.  $T$  geht aus dem Multiplikationsoperator mit der reellwertigen Funktion  $k \mapsto -\frac{1}{2}|k|^2$  durch Fouriertransformation hervor und ist daher selbstadjungiert. Der Operator  $V$  der Multiplikation mit der ebenfalls reellwertigen Funktion  $-\frac{1}{|x|}$  ist auch selbstadjungiert, und  $D(T) \subset D(V)$ , da  $V\psi$  für jede stetige quadratintegrierbare Funktion  $\psi$  quadratintegrierbar ist.

Sobald also gezeigt ist, dass  $V \ll T$ , folgt, dass  $H = T + V$  definiert auf  $D(T)$  selbstadjungiert ist.

**Satz 4.12**  $V \ll T$ , d.h. es gibt zu jedem  $a > 0$  ein  $b < \infty$  mit der Eigenschaft, dass

$$\|V\Psi\| \leq a\|\Delta\Psi\| + b\|\Psi\|.$$

*Beweis.*<sup>11</sup>

<sup>11</sup>vgl. [6], Lemma 1.6.4. In der Vorlesung wurde anders und aufwendiger argumentiert.

- Für jedes  $\alpha < 1$  und jedes  $\beta > 0$  gibt es ein  $\gamma < \infty$  mit der Eigenschaft, dass  $x^\alpha \leq \beta x + \gamma$  für alle  $x > 0$ .
- Für jedes  $\delta > 0$  ist die durch  $f_\delta(k) := (1 + \|k\|)^{-\frac{3}{4}-\delta}$  definierte Funktion quadratintegrierbar.
- Es sei  $\Psi$  eine Wellenfunktion aus dem maximalen Definitionsbereich von  $\Delta$ . Dann ist die Fouriertransformierte  $\widehat{\Psi}$  für jedes  $\delta \leq \frac{1}{4}$  im maximalen Definitionsbereich des Multiplikationsoperators mit der durch  $g_\delta(k) := (f_\delta(k))^{-1}$  definierten Funktion enthalten.
- Ist nun  $0 < \delta < \frac{1}{4}$ , so folgt mit  $\alpha := \frac{3}{4} + \delta$ , dass es zu jedem  $\beta > 0$  ein  $\gamma < \infty$  gibt mit

$$\begin{aligned}
\|V\Psi\| &\leq \|V\| \|\Psi\| = \|V\| \|\widehat{\Psi}\| \leq \underbrace{\|V\| \|f_\delta\|}_{=:C} \|g_\delta \widehat{\Psi}\| \\
&= C \left\| k \mapsto (1 + \|k\|^2)^\alpha \widehat{\Psi}(k) \right\| \\
&\leq C \left\| k \mapsto (\beta(1 + \|k\|^2) + \gamma) \widehat{\Psi}(k) \right\| \\
&\leq \beta C \left\| k \mapsto \|k\|^2 \widehat{\Psi}(k) \right\| + (\beta + \gamma) \|\widehat{\Psi}\| \\
&= \beta C \|\Delta\Psi\| + (\beta + \gamma) \|\Psi\|.
\end{aligned}$$

- $C$  ist fest und  $\beta > 0$  ist frei wählbar, also ist  $a := \beta C$  frei wählbar. Dann erfüllt  $b := \beta + \gamma$  die behauptete Bedingung.  $\square$

## 5 Selbstadjungierte Erweiterungen symmetrischer Operatoren

Im Folgenden sei  $A$  ein symmetrischer Operator in einem Hilbertraum  $\mathcal{H}$ .

**Satz 5.1** Für jedes  $\zeta \in \mathbb{C} \setminus \mathbb{R}$  gilt

$$\dim \operatorname{Ker}(A^* - \zeta) = \dim \operatorname{Ker}(A^* - s\zeta),$$

wobei  $s := \operatorname{sgn}(\operatorname{Im} \zeta)$ .

*Beweis.*<sup>12</sup> Wir zeigen, dass

$$\dim \operatorname{Ker}(A^* - \zeta) = \dim \operatorname{Ker}(A^* - (\zeta + \eta))$$

für alle  $\eta \in \mathbb{C}$  mit  $|\eta| < |\operatorname{Im}(\zeta)|$ .

- Es genügt zu zeigen, dass

$$\dim \operatorname{Ker}(A^* - \zeta) \geq \dim \operatorname{Ker}(A^* - (\zeta + \eta))$$

für alle  $\eta \in \mathbb{C}$  mit  $|\eta| < |\operatorname{Im}(\zeta)|$ .

<sup>12</sup>siehe auch Thm. X.1 in [13].

- Angenommen also, es gebe ein  $\eta$  mit  $|\eta| < |\operatorname{Im}(\zeta)|$ , für das

$$\dim \operatorname{Ker}(A^* - \zeta) < \dim \operatorname{Ker}(A^* - (\zeta + \eta)).$$

Dann gibt es in  $\operatorname{Ker}(A^* - (\zeta + \eta))$  einen zu  $\operatorname{Ker}(A^* - \zeta)$  orthogonalen Einheitsvektor  $u$ .

- Da  $A$  dicht definiert ist, folgt aus Lemma 3.6, dass  $u$  in

$$\operatorname{Ker}(A^* - \zeta)^\perp = \operatorname{Ker}((A - \bar{\zeta})^*)^\perp = \overline{\operatorname{Ran}(A - \bar{\zeta})} = \overline{D((A - \bar{\zeta})^{-1})}$$

liegen muss.

- Da  $A$  symmetrisch ist, folgt aus Lemma 4.10, dass einerseits

$$|\operatorname{Im} \zeta|^{-1} \geq \|(A - \bar{\zeta})^{-1}\| \geq |\langle u, (A - \bar{\zeta})^{-1}u \rangle| =: |\langle u, x \rangle|,$$

während andererseits

$$0 = \langle (A^* - (\zeta + \eta))u, x \rangle = \langle u, (A - \bar{\zeta})x \rangle - \bar{\eta} \langle u, x \rangle = 1 - \bar{\eta} \langle u, x \rangle.$$

- Dies steht aber im Widerspruch zu der Annahme, dass  $|\eta| < |\operatorname{Im}(\zeta)|$ .

□

**Korollar 5.2** *Ist  $A$  nicht wesentlich selbstadjungiert, so ist das Spektrum von  $A$  entweder  $\mathbb{R} + i\mathbb{R}^{\geq 0}$  oder  $\mathbb{R} - i\mathbb{R}^{\geq 0}$  oder  $\mathbb{C}$ .*

**Definition 5.3** *Die Räume  $\mathcal{K}_\pm := \operatorname{Ker}(A^* \mp i)$  werden die **Defekträume** von  $A$  genannt. Ihre Dimensionen  $(n_+, n_-)$  werden als **Defektindizes** oder auch **Defektzahlen** bezeichnet.*

Die Defektzahlen sind nicht notwendigerweise endlich; Beispiele mit endlichen Defektzahlen spielen jedoch eine große Rolle in den Anwendungen; sie haben, wie wir im Folgenden sehen werden, die Eigenschaft, dass es bei der Suche nach selbstadjungierten Erweiterungen endlich viele Freiheitsgrade gibt.

Die auf  $\mathcal{K}_\pm$  definierten Operatoren  $K_\pm := A^*|_{\mathcal{K}_\pm}$  sind Multiplikationsoperatoren mit  $\pm i$  und besitzen die Graphen  $\Gamma(K_\pm) := \{(x, \pm ix) : x \in \mathcal{K}_\pm\}$ , die selbstverständlich abgeschlossen sind.

**Lemma 5.4** *Ist  $A$  abgeschlossen, so gilt in dem Hilbertraum  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$*

$$\Gamma(A^*) = \Gamma(A) \oplus \Gamma(K_+) \oplus \Gamma(K_-).$$

*Beweis.*<sup>13</sup>

- Da  $A^*$ ,  $A$  und  $K_\pm$  abgeschlossene Operatoren sind, sind  $\Gamma(A^*)$ ,  $\Gamma(A)$  und  $\Gamma(K_\pm)$  abgeschlossene Unterräume von  $\mathcal{H} \oplus \mathcal{H}$ .

<sup>13</sup>vgl. auch S. 139 in [13].

- Dass  $\Gamma(A) \perp \Gamma(K_+) \perp \Gamma(K_-) \perp \Gamma(A)$ , zeigt man durch direktes Nachrechnen: Ist  $(x, Ax) \in \Gamma(A)$  und  $(v, iv) \in \Gamma(K_+)$ , so gilt

$$\langle (x, Ax), (v, iv) \rangle = \langle x, v \rangle + \langle Ax, iv \rangle = \langle x, v \rangle + \langle x, A^*iv \rangle = 0;$$

ist  $(w, -iw) \in \Gamma(K_-)$ , so zeigt man  $(x, Ax) \perp (w, -iw)$  auf dieselbe Weise, und mit

$$\langle (v, iv), (w, -iw) \rangle = \langle v, w \rangle + \langle iv, -iw \rangle = 0$$

ist man fertig.

- Zu zeigen bleibt, dass jedes zu  $\Gamma(A)$  und  $\Gamma(K_\pm)$  orthogonale  $(x, A^*x) \in \Gamma(A^*)$  der Nullvektor sein muss. Es sei also  $(x, A^*x) \in \Gamma(A^*)$  orthogonal zu  $\Gamma(A)$ ,  $\Gamma(K_+)$  und  $\Gamma(K_-)$

- Da  $(x, A^*x) \perp \Gamma(A)$  nach Voraussetzung, gilt für jedes  $z \in D(A)$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle (x, A^*x), (z, Az) \rangle \\ &= \langle x, z \rangle + \langle A^*x, Az \rangle \end{aligned}$$

also ist  $A^*x \in D(A^*)$ , und

$$0 = (A^*A^* + 1)x = (A^* + i)(A^* - i)x,$$

d.h.  $(A^* - i)x \in \mathcal{K}_-$ .

- Da  $(x, A^*x) \perp \Gamma(K_-)$  nach Voraussetzung, folgt für jedes  $u \in \mathcal{K}_-$  aus

$$0 = \langle (u, A^*u), (x, A^*x) \rangle = \langle u, x \rangle + i\langle u, A^*x \rangle,$$

dass

$$\langle u, (A^* - i)x \rangle = \langle u, A^*x \rangle - \langle u, ix \rangle = 0,$$

d.h.  $(A^* - i)x \in \mathcal{K}_-^\perp$ .

- Damit ist bewiesen, dass  $(A^* - i)x \in \mathcal{K}_- \cap \mathcal{K}_-^\perp = \{0\}$ , folglich ist  $x \in \text{Ker}(A^* - i) = \mathcal{K}_+$ .
- Auf dieselbe Weise lässt sich jedoch zeigen, dass  $x \in \text{Ker}(A^* + i) = \mathcal{K}_-$ . Da aber  $\mathcal{K}_+ \cap \mathcal{K}_- = \{0\}$ , folgt hieraus  $x = 0$ .

□

Es sei nun  $A$  ein abgeschlossener symmetrischer Operator. Wenn seine Defektzahlen miteinander übereinstimmen, so sind die Defekträume isomorph. Für jeden unitären Operator  $U : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$  ist dann auf dem Definitionsbereich

$$D(A_U) := \{x + v + Uv : x \in D(A), v \in \mathcal{K}_+\}$$

eine Erweiterung  $A_U$  von  $A$  definiert durch

$$A_U(x + v + Uv) := A^*(x + v + Uv) = Ax + iv - iUv.$$

**Satz 5.5**  $A_U$  ist selbstadjungiert.

*Beweis.*

- $A_U$  ist symmetrisch, denn für beliebige Elemente  $x+v+Uv$  und  $z+w+Uw$  von  $D(A_U)$  gilt

$$\begin{aligned}
\langle A_U(x+v+Uv), z+w+Uw \rangle &= \langle A^*(x+v+Uv), z+w+Uw \rangle \\
&= \underbrace{\langle x+v+Uv, Az \rangle}_{=:T_1} + \langle Ax+iv-iUv, w+Uw \rangle \\
&= T_1 + \underbrace{\langle x, A^*(w+Uw) \rangle}_{=:T_2} + \langle iv-iUv, w+Uw \rangle \\
&= T_1 + T_2 + \langle v, -iw \rangle + \langle Uv, iw \rangle + \langle v, -iUw \rangle + \langle v, iw \rangle \\
&= T_1 + T_2 + \langle v+Uv, A^*(w+Uw) \rangle \\
&= \langle x+v+Uv, A_U(z+w+Uw) \rangle,
\end{aligned}$$

d.h.  $A \subset A_U \subset A_U^* \subset A^*$ .

- Dass  $A_U$  wesentlich selbstadjungiert ist, folgt aus Theorem 3.11 durch Berechnen von  $\text{Ran}(A_U \pm i)$ . Für jedes  $x+v+Uv \in D(A_U)$  gilt nämlich

$$\begin{aligned}
(A_U + i)(x+v+Uv) &= Ax+iv-iUv+ix+iv+iUv \\
&= (A+i)x+2iv,
\end{aligned}$$

woraus folgt, dass

$$\text{Ran}(A_U + i) = \text{Ran}(A + i) + \text{Ker}(A^* - i) = \text{Ran}(A + i) + \text{Ran}(A + i)^\perp,$$

und dies ist ein dichter Unterraum.

- Es bleibt zu zeigen, dass  $A_U$  abgeschlossen ist.

– Hierzu bemerken wir, dass

$$\Gamma(A_U) = \Gamma(A) + \Gamma(K_U),$$

wobei

$$\Gamma(K_U) := \{(v+Uv, A^*(v+Uv)) : v \in \mathcal{K}_+\}.$$

– Da  $K_U$  beschränkt ist, ist  $K_U$  abgeschlossen, da auch  $\Gamma(A)$  abgeschlossen ist, muss  $\Gamma(A) + \Gamma(K_U)$  abgeschlossen sein.

$A_U$  ist somit wesentlich selbstadjungiert und abgeschlossen, also selbstadjungiert. □

Umgekehrt kann man zeigen, dass alle selbstadjungierten Erweiterungen eines symmetrischen Operators von dieser Form sein müssen.

**Satz 5.6** *Ist  $A$  abgeschlossen und  $B$  eine selbstadjungierte Erweiterung von  $A$ , so gibt es einen unitären Operator  $U : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$  mit  $B = A_U$ .*

*Beweis.*

- Da  $B$  eine symmetrische Erweiterung von  $A$  ist, gilt

$$A \subset B \subset B^* \subset A^*,$$

also gilt  $D(B) \subset D(A^*)$ .

- Für jedes  $z \in D(B)$  gibt es daher ein  $x \in D(A)$  sowie  $v, w \in \mathcal{K}_\pm$  mit  $z = x + v + w \in D(B)$ .
- Wählt man  $z, x, v$  und  $w$  in dieser Weise, so gilt

$$\begin{aligned} 0 &= \langle B(x + v + w), x + v + w \rangle - \langle x + v + w, B(x + v + w) \rangle \\ &= \langle Ax + iv - iw, x + v + w \rangle - \langle x + v + w, Ax + iv - iw \rangle \\ &= \underbrace{\langle Ax, x \rangle - \langle x, Ax \rangle}_{=0} + \underbrace{\langle Ax, v + w \rangle - \langle x, A^*(v + w) \rangle}_{=0} \\ &\quad + \langle iv, v \rangle - \langle iw, w \rangle - \langle v, iv \rangle + \langle w, iw \rangle \\ &= 2i(\|w\|^2 - \|v\|^2). \end{aligned}$$

$v$  und  $w$  haben also die gleiche Länge.

- Da  $x$  in der soeben gezeigten Identität gar nicht mehr auftaucht, kann es zu jedem  $v \in \mathcal{K}_+$  maximal ein  $w_v \in \mathcal{K}_-$  geben mit der Eigenschaft, dass es ein  $x \in D(A)$  gibt mit  $x + v + w_v \in D(B)$ , und es kann zu jedem  $w \in \mathcal{K}_-$  maximal ein  $v_w \in \mathcal{K}_+$  geben mit der Eigenschaft, dass ein  $x \in D(A)$  existiert mit  $x + v_w + w \in D(B)$ . Dies definiert in eindeutiger Weise einen unitären Operator  $U : v \mapsto w_v$  von einem abgeschlossenen Unterraum  $D(U)$  von  $\mathcal{K}_+$  auf einen abgeschlossenen Unterraum  $\text{Ran}(U)$  von  $\mathcal{K}_-$ .
- Zu jedem  $z \in D(B)$  gibt es somit ein  $x \in D(A)$  und ein  $v \in D(U)$  mit  $z = x + v + Uv$ . Zu zeigen bleibt, dass  $D(U) = \mathcal{K}_+$ , dass also insbesondere

$$\Gamma(B) = \Gamma(A) \oplus \Gamma(K_U),$$

wobei  $D(K_U) = \{(v, Uv) : v \in D(U)\}$ .

- Da  $D(U)$  abgeschlossen ist, muss es anderenfalls einen Vektor  $v \in \mathcal{K}_+$  geben mit der Eigenschaft, dass  $(v, A^*v) \perp \Gamma(B)$ . In diesem Fall gilt aber für jedes  $x + w + Uv \in D(B)$

$$\begin{aligned} 0 &= \langle (v, A^*v), (x + w + Uv, B(x + w + Uv)) \rangle \\ &= \langle v, x + w + Uv \rangle + \langle iv, B(x + w + Uv) \rangle \\ &= -i(\langle -iv, x + w + Uv \rangle + \langle v, B(x + w + Uv) \rangle), \end{aligned}$$

womit folgt, dass  $v \in D(B^*) = D(B)$ .

- Da aber  $v \perp D(B)$  nach Voraussetzung, folgt  $v = 0$ .

□

Die Observablen Impuls und Energie des freien Teilchens, des Teilchens vor einer Wand sowie des Teilchens im Kasten werden nun hinsichtlich ihrer möglichen Darstellungen als selbstadjungierte Operatoren untersucht. Dabei wird jeweils von den üblichen Differentialoperatoren ausgegangen; die negativen Vorzeichen werden jedoch ignoriert; dies erleichtert die Übersicht.

### Beispiel 5.7 (Impuls eines Teilchens auf einer Geraden)

Auf dem Definitionsbereich  $D(\underline{P}) := \mathcal{D}_1$  der Testfunktionen auf der Geraden sei der hermitesche Differentialoperator  $\underline{P}$  definiert durch  $\underline{P}\varphi := i\varphi'$ . Die Differentialgleichungen  $iu' = \pm iu$  besitzen die Lösungen  $u_{\pm}(x) := e^{\pm x}$ . Diese sind nicht in  $L^2(\mathbb{R})$  enthalten, also hat  $\underline{P}$  die Defektzahlen  $(0, 0)$  und ist wesentlich selbstadjungiert.  $\underline{P}^*$  ist der Abschluss und damit die einzige selbstadjungierte Erweiterung von  $\underline{P}$ . □

### Beispiel 5.8 (Impuls eines Teilchens vor einer Wand)

In dem Hilbertraum  $L^2(\mathbb{R}^{\geq 0})$  eines Teilchens vor einer undurchdringbaren Wand ist auf dem Definitionsbereich  $D(\underline{P}) := C_0^\infty(\mathbb{R}^{> 0})$  ein symmetrischer Operator  $\underline{P}$  definiert durch  $\underline{P}\varphi := i\varphi'$

Die Einschränkung  $\Psi_- := u_-|_{\mathbb{R}^{> 0}}$  ist im Definitionsbereich von  $\underline{P}^*$  enthalten; die Einschränkung  $\Psi_+ := u_+|_{\mathbb{R}^{> 0}}$  hingegen ist nicht einmal quadratintegrierbar. Somit ergeben sich die Defektzahlen zu  $(0, 1)$ , und  $\underline{P}$  kann keine selbstadjungierten Erweiterungen besitzen. □

### Beispiel 5.9 (Impuls eines Teilchens im Kasten)

In dem Hilbertraum  $L^2([-1, 1])$  eines Teilchens in einem eindimensionalen, mit undurchdringbaren Wänden versehenen Kasten und auf dem Definitionsbereich  $D(\underline{P}) := C_0^\infty((-1, 1))$  der Testfunktionen mit von den Wänden getrenntem Träger ist der Differentialoperator  $\underline{P}$  definiert durch  $\underline{P}\varphi := i\varphi''$ .

Beide Funktionen  $\Psi_{\pm} := u_{\pm}|_{[-1, 1]}$  sind Elemente von  $D(\underline{P}^*)$ , lösen die Eigenwertgleichung  $\underline{P}^*\Psi_{\pm} = \pm i\Psi_{\pm}$  und spannen somit zwei eindimensionale Defekträume auf. Dies ergibt Defektzahlen  $(1, 1)$  also besitzt  $\underline{P}$  selbstadjungierte Erweiterungen.

Zu jedem unitären Operator  $U : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$  gibt es genau ein  $\omega \in S^1$  mit der Eigenschaft, dass  $U\Psi_+ = \omega\Psi_-$ . Man erhält also

$$D(\underline{P}_U) = \{\varphi + \alpha\Psi_+ + \omega\alpha\Psi_- : \varphi \in D(\underline{P}), \alpha \in \mathbb{C}\}.$$

Für jedes Element  $\Psi$  von  $D(\underline{P}_U)$  gilt also

$$\Psi(1) = \alpha(\Psi_+(1) + \omega\Psi_-(1)) = \alpha(\Psi_-(-1) + \omega\Psi_+(-1)) = \omega^{-1}\Psi(-1).$$

Man prüft nun nach, dass der Abschluss  $P_\omega$  dieses Operators den Definitionsbereich

$$D(P_\omega) := \{\Psi : D\Psi \in L^2, \Psi(-1) = \omega\Psi(1)\}$$

besitzt. Mit der Wahl  $\omega = 1$  ist eine periodische Randbedingung möglich.

Die Wirkung der durch  $P_\omega$  erzeugten einparametrischen Gruppe  $e^{-iaP_\omega}$ ,  $a \in \mathbb{R}$ , ist nun leicht zu errechnen. Da der Impulsoperator im Inneren des Kastens Translationen erzeugt und da  $e^{-iaP_\omega} D(P_\omega) = D(P_\omega)$  gelten muss, folgt aus der Randbedingung, dass  $(e^{-2iP_\omega} \Psi(x)) = \omega \Psi(x)$ .

Die Wahl  $\omega = 1$  ergibt periodische Randbedingungen, und  $P_1$  kann als der Drehimpulsoperator eines Teilchens auf dem Kreis betrachtet werden.

Es gibt allerdings kein  $\omega$ , mit dem der Wahrscheinlichkeitsstrom  $j_\Psi(x) := i(\overline{\Psi'(x)}\Psi(x) - \Psi(x)\overline{\Psi'(x)})$  an den Wänden für alle Elemente des Definitionsbereiches  $D(P_\omega)$  verschwindet — was er sollte, will man die Wände des Kastens als solche interpretieren. Das ist die zwingende Konsequenz der fehlenden Translationsinvarianz. Die Operatoren  $P_\omega$  sind somit nicht als Impulsoperatoren im Kasten zu betrachten. Allerdings ist es sinnvoll, den Operator  $P_1$  als den Drehimpulsoperator auf dem Kreis aufzufassen, da dieser die zum Drehimpuls gehörende Rotationssymmetrie aufweist.  $\square$

### Beispiel 5.10 (Energie eines freien Teilchens auf einer Geraden)

Auf dem Definitionsbereich  $D(\underline{T}) := \mathcal{D}_1$  sei der symmetrische Operator  $\underline{T}$  definiert durch  $\underline{T}\varphi := \varphi''$ .

Mit den Bezeichnungen  $\sqrt{\pm i} := e^{\pm i\pi/4}$  findet man, dass der zweidimensionale Lösungsraum der gewöhnlichen Differentialgleichung  $u'' = iu$  durch die Funktionen  $u^+(x) := e^{\sqrt{i}x}$  und  $u_+(x) := e^{-\sqrt{i}x}$  aufgespannt wird. Der Lösungsraum der Gleichung  $u'' = -iu$ , wird durch die Funktionen  $u^-(x) := e^{\sqrt{-i}x}$  und  $u_-(x) := e^{-\sqrt{-i}x}$  aufgespannt. Keine dieser Funktionen ist allerdings quadratintegrierbar, somit besitzt  $\underline{T}$  die Defektzahlen  $(0, 0)$  und ist folglich wesentlich selbstadjungiert. Der Definitionsbereich des Abschlusses  $T$  von  $\underline{T}$  ist der Raum aller  $\Psi \in D(T^*)$ , für die  $T^*\Psi \in L^2(\mathbb{R})$ .

$T$  ist zu unterscheiden vom Laplace-Operator! Dieser definiert sich über die schwache Ableitung und ist *nicht* selbstadjungiert; vgl. Beispiel 1.22  $\square$

### Beispiel 5.11 (Energie eines Teilchens vor einer Wand.)

Auf dem Definitionsbereich  $D(\underline{T}) := C_0^\infty(\mathbb{R}^{>0})$  ist der symmetrische Operator  $\underline{T}$  definiert durch  $\underline{T}\varphi = \varphi''$ .

Die Defekträume sind eindimensional und werden aufgespannt durch die Funktionen  $\Psi_\pm := u_\pm|_{\mathbb{R}^{\geq 0}}$ , wobei  $u_\pm$  gewählt werden wie oben. Es gilt nämlich für jedes  $\varphi \in D(\underline{T})$

$$\int \overline{\Psi_\pm(x)} \varphi''(x) dx = -\sqrt{\pm i} \int \overline{\Psi_\pm(x)} \varphi'(x) dx = \pm i \int \overline{\Psi_\pm(x)} \varphi(x) dx;$$

die Randterme verschwinden wegen  $0 \notin \text{supp } \varphi$ . Die Funktionen  $u^\pm|_{\mathbb{R}^{\geq 0}}$  sind nicht quadratintegrierbar. Die Defektzahlen  $(1, 1)$  stimmen also überein, folglich besitzt  $\underline{T}$  selbstadjungierte Erweiterungen.

Wie in Beispiel 5.9 ist jeder unitäre Operator  $U : \mathcal{K}_+ \rightarrow \mathcal{K}_-$  von der Gestalt  $\alpha\Psi_+ \mapsto \omega\Psi_-$ , wobei  $\omega \in S^1$ . Somit folgt

$$D(\underline{T}_U) = \{\varphi + \alpha\Psi_+ + \omega\alpha\Psi_-\}.$$

Für  $\omega = -1$  erhält man die Dirichletsche Randbedingung.

Für  $\omega \neq -1$  erfüllen und jedes  $\Psi \in D(\underline{T}_U)$  ist der Parameter

$$\lambda_\omega := \frac{\Psi'(0)}{\Psi(0)} = -2^{-1/2} \left( 1 + \frac{\operatorname{Im} \omega}{1 + \operatorname{Re} \omega} \right)$$

reellwertig. Die Reellwertigkeit dieses Quotienten ist allgemein hinreichend und notwendig dafür, dass der Wahrscheinlichkeitsstrom an der Wand verschwindet; *alle* selbstadjungierten Erweiterungen von  $\underline{T}$  können also als Energieoperatoren interpretiert werden. Die Randbedingung hängt ab sowohl von den Eigenschaften der Wand als auch von denen des Teilchens.

Wir kennzeichnen den (selbstadjungierten) Abschluss des (wesentlich selbstadjungierten) Operators  $\underline{T}_U$  mit  $T_\omega$ . Der Definitionsbereich der jeweiligen Erweiterung ist nun der abgeschlossene Unterraum von  $D(\underline{T})$ , die der entsprechenden Randbedingung genügen.

Für  $\operatorname{Im} \omega > 0$  ist  $\lambda < 0$ . In diesem Fall besitzt das System genau einen gebundenen Zustand; dieser wird durch die Wellenfunktion  $\Psi_\lambda(x) := e^{-\lambda x}$  beschrieben und besitzt die Energie  $-\lambda^2$ . Die Wand ist in diesem Fall also als anziehend zu betrachten; je kleiner  $\lambda$  wird, umso stärker die Anziehung.

Analog ist die Wand für  $\lambda > 0$  als abstoßend betrachten, und zwar umso stärker, je größer  $\lambda$  ist; der Fall  $\lambda = 0$  entspricht der Neumannschen Randbedingung, die eine sich neutral verhaltende Wand beschreibt.

$\lambda$  charakterisiert also das Zusammenspiel der Eigenschaften des Wandmaterials mit den Eigenschaften des Teilchens. Es ist von fundamentaler Bedeutung für die Dynamik des Systems.

Der Grenzfall der Dirichletschen Randbedingung beschreibt die unendlich stark abstoßende Wand. Es gibt keinen gebundenen Zustand, und die Wahrscheinlichkeitsdichte am Ort der Wand verschwindet.  $\square$

### Beispiel 5.12 (Energie eines Teilchens im Kasten)

Auf  $D(\underline{T}) := C_0^\infty((-1, 1))$  ist der Operator  $\underline{T}$  definiert durch  $\underline{T}\varphi := \varphi''$ . Die Funktionen  $\Psi_\pm^\pm := u_\pm^\pm|_{[-1, 1]}$  sind allesamt enthalten in  $D(\underline{T}^*)$ , somit erhält man die Defektzahlen  $(2, 2)$ , und  $\underline{T}$  muss selbstadjungierte Erweiterungen besitzen.

Für jeden unitären Operator  $U$  mit Matrixelementen  $a, b, c, d \in \mathbb{C}$  gilt nun

$$D(\underline{T}_U) = \{\varphi + \alpha\Psi^+ + \beta\Psi_+ + (a\alpha + b\beta)\Psi^- + (c\alpha + d\beta)\Psi_-, \alpha, \beta \in \mathbb{C}\}. \quad (3)$$

Die zulässigen Kombinationen von Koeffizienten einer unitären Matrix sind recht vielgestaltig und werden hier nicht alle besprochen.

In dem einfachen Fall, dass  $a = d = \pm 1$ , geht man vor wie oben, benutzt  $\Psi^\pm(1) = \Psi_\pm(-1)$ , und erhält periodische bzw. antiperiodische Randbedingungen für sowohl die Wellenfunktionen im Definitionsbereich als auch deren 1. Ableitungen. Wie beim Impuls lässt sich der Fall der periodischen Randbedingungen zum Laplace-Operator auf dem Kreis "umbiegen".

Da die Absolutbeträge von  $\Psi^+(1) = \exp((1+i)/\sqrt{2})$  und  $\Psi^-(1) = \exp((1-i)/\sqrt{2})$  sowie die Beträge von  $\Psi_+(1) = \exp((-1-i)/\sqrt{2})$  und  $\Psi_-(1) = \exp((-1+i)/\sqrt{2})$  übereinstimmen, erhält man mit  $a := \exp(i\sqrt{2})$  und  $d = \exp(-i\sqrt{2})$

Dirichletsche Randbedingungen. Auch Neumannsche Randbedingungen lassen sich durch geeignete Wahl von  $a$  und  $d$  realisieren.

Für die Frage, inwiefern eine selbstadjungierte Erweiterung von  $\underline{T}$  als Energie eines Teilchens im Kasten zu interpretieren sei, ist jedoch das Verschwinden des Wahrscheinlichkeitsstroms an den Wänden entscheidend. Ist daher  $T$  eine beliebige selbstadjungierte Erweiterung von  $\underline{T}$  mit dieser Eigenschaft, so gibt einen reellen Parameter  $\lambda$  mit  $\lambda = \Psi'(1)/\Psi(1)$  für alle  $\Psi \in D(T)$ , oder es gilt die Dirichletsche Randbedingung, die wir mit “ $\lambda = \infty$ ” kennzeichnen. Entsprechend legt ein Parameter  $\mu \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  die Randbedingung an der Stelle  $-1$  fest.

Für  $\mu, \lambda \in \mathbb{R} \cup \{\infty\}$  sei nun  $D_{\mu\lambda}$  der Raum aller Elemente von  $\underline{T}$ , die den durch  $\mu$  und  $\lambda$  festgelegten Randbedingungen genügen, und auf  $D_{\mu\lambda}$  sei der Operator  $T_{\mu\lambda} := T^*|_{D_{\mu\lambda}}$  definiert.

Der Definitionsbereich von  $T_{\mu\lambda}^*$  ist jedoch kleiner als der von  $\underline{T}^*$ . Insbesondere erhält er nicht die Funktionen  $\Psi_{\pm}^{\pm}$ . Will man nämlich vorgehen wie in den diversen Fällen für  $\underline{P}$  und  $\underline{T}$ , so wird man hier mit dem Problem konfrontiert, dass beim partiellen Integrieren die Randterme nicht mehr verschwinden.  $T_{\mu\lambda}^*$  ist also wesentlich selbstadjungiert.  $\square$

Jochen Zahn und Reinhard Lorenzen möchte ich für die gründliche Durchsicht wesentlicher Teile dieses Manuskripts danken. Für Hinweise auf mögliche Fehler bin ich jederzeit dankbar.

## Literatur

- [1] Bratteli, O., Robinson, D. W.: Operator Algebras and Quantum Statistical Mechanics 1, Springer 1979, 1987 (2. korr. Druck 2002)
- [2] — Vol. 2, Springer Berlin 1981, 1997 (2. korr. Druck 2002). Beide Bände können auf der Homepage von O. Bratteli (Oslo) eingesehen und heruntergeladen werden.
- [3] Buchholz, D.: Einführung in die Algebraische Quantenfeldtheorie, Vorlesungsnotizen (Hamburg, 1985)
- [4] Dennery, P., Krzywicki, A.: Mathematics for Physicists. Harper & Row 1967
- [5] Fredenhagen, K.: Quantenmechanik I, Vorlesungsskript (WS 1999/2000), [www.desy.de/uni-th/lqp/notes.html](http://www.desy.de/uni-th/lqp/notes.html)
- [6] Glimm, J., Jaffe, A., Quantum Physics, 2nd ed., Springer 1987
- [7] Haag, R.: Local Quantum Physics, Springer 1992, (2. Auflage 1996)
- [8] Hirzebruch, F., Scharlau, W.: Einführung in die Funktionalanalysis. BI-Taschenbuch 296 a, 1971

- [9] Kadison, R. V., Ringrose, J. R.: Fundamentals of the Theory of Operator Algebras, I, Academic Press 1983
- [10] Prugovecki, E.: Quantum Mechanics in Hilbert Space. Academic Press, 1971
- [11] Pusz, W., Woronowicz, S. L.: Passive States and KMS States for General Quantum Systems. *Commun. Math. Phys.* **58**, 273-290 (1978)
- [12] Reed, M. Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics I: Functional Analysis. Academic Press, 1972
- [13] Reed, M. Simon, B.: Methods of Modern Mathematical Physics II: Fourier Analysis, Self Adjointness. Academic Press, 1972
- [14] Schwabl, F.: Quantum Mechanics (2nd Ed.). Springer, 1995
- [15] Streater, R. F., Wightman, A. S.: PCT, Spin & Statistics, and All That, Benjamin 1964
- [16] Thirring, W.: Lehrbuch der Mathematischen Physik, Bd. 4: Quantenmechanik großer Systeme, Springer, 1980
- [17] Weidmann, J.: Lineare Operatoren in Hilberträumen. Teubner, 1976
- [18] Werner, D.: Funktionalanalysis, 3. Auflage, Springer 2000